

**ESTANDARIZACIÓN PARA EL LABORATORIO DE ANÁLISIS DE AGUAS Y
ALIMENTOS DE LA UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA DE PEREIRA DEL
MÉTODO PARA LA DETERMINACIÓN DE METANOL, ETANOL Y
ALCOHOLES SUPERIORES EN BEBIDAS ESPIRITUOSAS A TRAVÉS DE
CROMATOGRAFÍA DE GASES (GC-FID)**

TRABAJO DE GRADO
Requisito parcial para optar el título de Químico Industrial

Presentado por:
CONSTANZA ANDREA ISAZA MAYA

UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA DE PEREIRA
FACULTAD DE TECNOLOGÍA
ESCUELA DE TECNOLOGÍA QUÍMICA
PEREIRA
2015

**ESTANDARIZACIÓN PARA EL LABORATORIO DE ANÁLISIS DE AGUAS Y
ALIMENTOS DE LA UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA DE PEREIRA DEL
MÉTODO PARA LA DETERMINACIÓN DE METANOL, ETANOL Y
ALCOHOLES SUPERIORES EN BEBIDAS ESPIRITUOSAS A TRAVÉS DE
CROMATOGRAFÍA DE GASES (GC-FID)**

**Presentado por:
CONSTANZA ANDREA ISAZA MAYA**

**TRABAJO DE GRADO
Requisito parcial para optar el título de Químico Industrial**

**Director:
Carlos Humberto Montoya Navarrete**

**UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA DE PEREIRA
FACULTAD DE TECNOLOGÍA
ESCUELA DE TECNOLOGÍA QUÍMICA
PEREIRA**

2015

- 2 -

NOTA DE ACEPTACIÓN DEL TRABAJO DE GRADO

ESTANDARIZACIÓN PARA EL LABORATORIO DE ANÁLISIS DE AGUAS Y ALIMENTOS DE LA UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA DE PEREIRA DEL MÉTODO PARA LA DETERMINACIÓN DE METANOL, ETANOL Y ALCOHOLES SUPERIORES EN BEBIDAS ESPIRITUOSAS A TRAVÉS DE CROMATOGRAFÍA DE GASES (GC-FID)

Presentado por:
CONSTANZA ANDREA ISAZA MAYA

El suscrito director y jurados del presente trabajo de grado, una vez revisada la versión escrita y presenciado la sustentación oral, decidimos otorgar la nota de:

Con la connotación:

Para la constancia firmamos en la ciudad de Pereira hoy ____ de ____, de ____.

Director: _____
Nombre: CARLOS HUMBERTO MONTOYA NAVARRETE

Jurado: _____
Nombre: JUAN PABLO ARRUBLA

Agradecimientos

En primer lugar a Dios, sin él nada de esto sería posible.

A mi madre, mi abuela y mi hermana, ellas han estado conmigo siempre, celebrando y alentándome a cada paso.

A Juan Pablo Duque Ramírez, quien me ha apoyado y ha sido incondicional.

Al profesor Carlos Humberto Montoya Navarrete, quien más que un director fue un amigo y un guía.

Al profesor Oscar Marino Mosquera, un asesor paciente y atento y a Lina Marcela Giraldo, otra de mis valiosas asesoras y mano derecha.

A todos los profesores de la escuela de Química, gracias a ellos crecí como persona y como profesional.

A Victoria, Javier y German, gracias a ellos por su apoyo, y su ayuda.

A todos los que de una u otra manera me han ayudado y me han acompañado a cumplir este sueño, mil gracias.

Contenido

1. Formulación del problema	10
2. Justificación.....	11
3. Objetivos	12
3.1 Objetivo general	12
3.2 Objetivos específicos	12
4. Marco teórico	13
4.1 Marco conceptual:	13
4.1.1 Bebidas espirituosas:	13
4.1.2 Cromatografía de gases:	14
4.1.3 Espectrometría infrarroja:	17
4.2 Marco legal:	19
4.2.1 Definiciones legales generales:	19
4.2.2 Definición de bebidas:.....	20
5. Metodología	22
5.1 Análisis con curvas de calibración por cromatografía de gases:	22
5.1.1 Materiales y equipos:	22
5.1.2 Preparación de muestras patrones:	23
5.1.3 Preparación de muestras:.....	24
5.1.4 Condiciones cromatográficas:	25
5.2 Análisis mediante la aplicación de la NTC 4118 por cromatografía de gases:	26
5.2.1 Materiales y equipos:	26
5.2.2 Preparación de soluciones:	27
5.2.3 Preparación de muestras:.....	29
5.2.4 Condiciones cromatográficas:	30
5.3 Análisis mediante espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier:	30
5.3.1 Materiales y equipos:	30
5.3.2 Preparación de muestras patrones:	31
5.3.3 Preparación de muestras:.....	32
5.3.4 Condiciones del equipo de Espectroscopia infrarroja:	33
6. Resultados y análisis	33

6.1 Análisis con curvas de calibración por cromatografía de gases:	33
6.1.1 Parámetros estadísticos generales:	34
6.1.2 Análisis multivariado:	36
6.1.3 Análisis de muestras:	38
En la tabla 15 se resumen los principales parámetros estadísticos que se evaluaron para los 8 alcoholes que fueron objeto de estudio, los análisis completos se encuentran en el anexo A.1.3.1 a A.8.3.1.	
6.2 Análisis mediante la aplicación de la NTC 4118 por cromatografía de gases	39
6.2.1 Datos de la preparación de las soluciones de trabajo	40
6.2.2 Parámetros estadísticos generales:	44
6.2.3 Análisis de muestras:	46
6.2.4 Análisis del estándar interno	50
6.3 Análisis mediante espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier.	51
6.3.1 Parámetros estadísticos generales:	53
6.3.2 Análisis multivariado	53
6.3.3 Análisis de muestras:	55
7. Conclusiones	56
8. Recomendaciones.....	57
Bibliografía	57
Anexos	59
Anexo A. Análisis de curvas de calibración por cromatografía de gases.....	59
A.1 Etanol	59
A.2 Metanol	64
A.3 Propanol	70
A.4 Isopropanol.....	75
A.5 Isobutanol.....	81
A.6 n-butanol	87
A.7 2-metil-1-butanol.....	91
A.8 2-butanol	97
Anexo B. Análisis mediante la aplicación de la NTC 4118 por cromatografía de gases.	101
B.1 Datos de la preparación de las soluciones de trabajo.....	101
B.2 Análisis de muestras	106
B.3 Ecuaciones sugeridas en la NTC 4118 para la determinación de la composición	

Anexo C. Análisis de curvas de calibración mediante espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier (FT-IR).	116
C.1 Etanol a 1043 cm^{-1}	116
C.2 Etanol 3274 cm^{-1}	119
C.3 Metanol 1013 cm^{-1}	128
C.4 Metanol 3271 cm^{-1}	134

Índice de tablas

Tabla 1. Preparación de la curva de etanol en agua como solvente	24
Tabla 2. Preparación de la curva de metanol en agua como solvente	24
Tabla 3. Preparación de la curva de alcoholes superiores en agua como solvente	24
Tabla 4. Condiciones cromatográficas para el método de curvas de calibración.	25
Tabla 5. Condiciones cromatográficas para la metodología planteada por la NTC 4118	30
Tabla 6. Preparación de la curva de etanol en agua como solvente	31
Tabla 7. Preparación de la curva de metanol en agua como solvente	31
Tabla 8. Condiciones del FTIR para el método de curvas de calibración.	33
Tabla 9. Resultados obtenidos para el día 1 de la curva de etanol.	34
Tabla 10. Parámetros estadísticos para el etanol 5% en cada día de análisis.	35
Tabla 11. Estimación lineal para el etanol en los 3 días de análisis.	36
Tabla 12. Resumen del análisis de varianza de un factor para etanol 5%	37
Tabla 13. Análisis de varianza de un solo factor para el etanol 5%	38
Tabla 14. Análisis de diferentes licores mediante metodología de curvas de calibración día 1	38
Tabla 15. Resumen de los principales parámetros estadísticos de los alcoholes analizados.	39
Tabla 16. Pesos de cada compuesto para la solución stock (A) de partida para el día 1	40
Tabla 17. Preparación de estándar de partida interno IS, (B) para el día 1.	41
Tabla 18. Solución estándar de trabajo de los factores de respuesta RF (C) el día 1	41
Tabla 19. Solución de estándar interno IS (D) día 1.	41
Tabla 20. Solución estándar de control de calidad (CC) día 1.	42
Tabla 21. Solución de control de calidad (CC) que contiene la solución (D) día 1.	42
Tabla 22. Resultados obtenidos para la estandarización en el día 1	42
Tabla 23. Información estadística de todos los componentes en los tres días de análisis.	44
Tabla 24. Análisis de diferentes licores mediante metodología NTC4118 día 1.	46
Tabla 25. Área del estándar interno en las muestras y en los controles	50
Tabla 26. Parámetros estadísticos generales para el IS	50
Tabla 27. Datos de la curva de calibración de etanol a 1043 cm^{-1} para el día 1	53
Tabla 28. Parámetros estadísticos generales de etanol a 1043 cm^{-1}	53
Tabla 29. Estimación lineal para de etanol a 1043 cm^{-1} en los 3 días de análisis.	54
Tabla 30. Resumen del análisis de varianza de un factor para etanol 5% a 1043 cm^{-1}	54
Tabla 31. Análisis de varianza de un solo factor para el etanol 5% a 1043 cm^{-1}	55
Tabla 32. Análisis de etanol (1043 cm^{-1}) en diferentes licores mediante la metodología de curvas de calibración FT-IR día 1	55
Tabla 33. Resumen de los parámetros estadísticos de etanol y metanol en las distintas longitudes de onda	56

Índice de figuras

Figura 1. Diseño simplificado de un cromatógrafo de gases. (Cromatografía de gases).....	15
Figura 2. Diagrama simplificado de un espectrómetro Infrarrojo con transformada de Fourier	18
Figura 3. Proceso de destilación para muestras de licores.	25
Figura 4. Preparación de la solución estándar de partida.....	27
Figura 5. Preparación de la solución estándar de partida de estándar interno	28
Figura 6. Preparación de la solución estándar de trabajo de los factores de respuesta RF ..	28
Figura 7. Preparación de la solución de trabajo del estándar interno.....	28
Figura 8. Preparación de la solución estándar de control de calidad	29
Figura 9. Preparación de la muestras de licor de interés.	29
Figura 10. Proceso de destilación para muestras de licores.	32
Figura 11. Cromatograma de mezcla de alcoholes al 1% por la metodología de curvas de calibración.	33
Figura 12. Cromatograma de muestra de control (C)	40
Figura 13. Espectro de absorbancia de metanol y etanol sobrepuestos	51
Figura 14. Análisis de etanol en el día 1 y la primera repetición.	52
Figura 15. Análisis de metanol en el día 1 y la primera repetición.	52

1. Formulación del problema

En los últimos años ha constituido un problema de salud pública la adulteración de licores, esto no es un caso particular para el país, a nivel mundial se ha intentado controlar dicha situación con mayores restricciones y legislaciones más fuertes, tal es el caso de múltiples proyectos de ley como la 075 del 2011, en las cuales se proponen límites menos tolerables y penalidades más severas y el decreto 1686 de 2012 que regula los requisitos sanitarios para la producción de bebidas alcohólicas ; no obstante el problema de salud está pasando a un segundo plano, ya que existen organizaciones muy bien estructuradas que están a cargo de la elaboración de estas bebidas dejándolas cada vez más difíciles de percibir como no lícitas. Toda esta situación está llevando a las licoreras a estados económicos graves, pero la adulteración no es solo problema de organizaciones delincuenciales, también de malos manejos dentro de las mismas industrias reconocidas que las han llevado a diferentes circunstancias penales (Zapata, 2012) (Proyecto de ley 075 de 2011 Cámara) (Kirk, Sawyer, & Egan, 2005)

La adulteración de bebidas alcohólicas o su mala producción pone en peligro al consumidor por la presencia de distintas sustancias que se producen durante el proceso de fermentación y tienen un carácter altamente tóxico, como lo es el metanol, el ácido cianhídrico, aldehídos y los aceites de fusel altos y bajos , estos últimos son constituidos por una mezcla de alcoholes que tienen mayor y menor punto de ebullición que el etanol (conocidos como alcoholes superiores), por eso mediante una correcta rectificación de la bebida alcohólica se puede hablar de una sustancia apta para el consumo humano, pero en dicha rectificación se pierden también algunos ésteres volátiles y aceites esenciales que confieren el aroma respectivo a cada licor (Vollmer, 1999) (Kirk, Sawyer, & Egan, 2005)

En el caso de las bebidas alcohólicas no se puede hablar de sano o insano y aunque su valor nutricional se basa únicamente en el contenido de alcohol, ya que tiene un elevado contenido calórico (que aumenta aún más en licores azucarados) es un producto de consumo masivo, que a lo largo de la historia se ha adaptado a las necesidades locales y la producción de la región (Vollmer, 1999), se habla entonces de una industria mundial que se ve regulada por diferentes entes como lo es el Consejo de Regulación Europea (UE) con la 110 / 2008 y en el caso de Colombia las Normas Técnicas Colombianas (Harris P.) (ICONTEC, 1997) (ICONTEC, 2007)

Ya que la producción de bebidas espirituosas de mala calidad o adulteración está teniendo un comportamiento exponencial con el pasar de los años y el aumento tecnológico se plantea lo siguiente:

¿Será posible realizar la estandarización de un método de cualificación y cuantificación de metanol, etanol y alcoholes superiores elaborados a escala basada en lo mencionado en la NTC 4118 para la Universidad Tecnológica de Pereira?

2. Justificación

Las bebidas espirituosas se producen por destilación de licores fermentados, de manera que la mayor parte del alcohol y otras sustancias volátiles pasan al destilado, además, estas tienen una probabilidad muy baja de descomponerse por su alto contenido de alcohol (Kirk, Sawyer, & Egan, 2005) (Harris P.) Dichas bebidas alcohólicas deben de tener un contenido de alcohol mínimo del 15 % en volumen, es decir, se consideran en el grupo de licores (Vollmer, 1999) (Kirk, Sawyer, & Egan, 2005) (Harris P.) (Mc Nair, 1981); para regular su producción y garantizar una bebida de buena calidad la UE ha descrito unas consideraciones que están consignadas en las normas 1576/89 EEC (Reglas generales para la definición, la descripción y la presentación de bebidas alcohólicas) (Kirk, Sawyer, & Egan, 2005), y en el artículo segundo de la 110/2008 del Parlamento Europeo (Harris P.), algunas de ellas son: Acidez total 1,5, expresados en gramos de ácido acético por hectolitro de alcohol a 100% vol, Esteres 1,3, expresados en gramos de acetato de etilo por hectolitro de alcohol a 100% vol, Aldehídos 0,5, expresados en gramos de acetaldehído por hectolitro de alcohol a 100% vol, Alcoholes superiores 0,5, expresados en gramos de metil-2 propanol-1 por hectolitro de alcohol a 100% vol, metanol 30, expresado en gramos por hectolitro de alcohol a 100% vol y furfural no debe ser detectable (Kirk, Sawyer, & Egan, 2005) (Harris P.)

La cromatografía de gases presenta ventajas sobre otras técnicas como alta resolución, velocidad, sensibilidad, sencillez y resultados cuantitativos (Robards, Haddad, & Jackson, 1994); además al equiparlo con un detector de ionización de flama (FID) se garantiza una excelente detección ya que este es considerado un detector universal (Chromatography fundamentals), la sensibilidad de este para sustancias orgánicas es de 0,1 a 1 nanoprogramo y el rango lineal es de 10^5 y 10^6 y no emite señal alguna frente a monóxido de carbono, dióxido de carbono, amoníaco, oxígeno, ozono, óxido de nitrógeno, dióxido de nitrógeno y agua (Robards, Haddad, & Jackson, 1994) (Chromatography fundamentals) (Harris D. , 1990). Además mediante el uso de estándares internos se puede cualificar con gran certeza la presencia de los compuestos de interés (Robards, Haddad, & Jackson, 1994) (Chromatography fundamentals) (Harris D. , 1990) (Merk, 2011). Los únicos cuidados que se deben de tener son principalmente con la columna, ya que a ella no pueden llegar sustancias en estado líquido, principalmente agua y metanol, pero esto se evita utilizando temperaturas adecuadas que garanticen la volatilización completa de dichas sustancias (Brill & Wagner, 2012).

Actualmente la cromatografía de gases permite determinar de manera efectiva y eficiente las concentraciones de alcoholes en una gran variedad de matrices (Restek), lo cual hace de esta una técnica óptima para el objetivo que se persigue con este estudio.

En Colombia se tiene una gran problemática con la mala calidad o adulteración de muchas

de las bebidas alcohólicas (Zapata, 2012), ocasionando ingestión accidental de sustancias como el metanol, que podría causar dolor de cabeza, vértigo, fatiga, náuseas, vómitos, visión borrosa, ceguera irreversible e incluso la muerte (Wang, ML; Wang, JT; Choong, YM, 2004). La dosis letal oral de metanol para los seres humanos varía de 340 ug / kg a 1 mg / kg de peso corporal (Wang, ML; Wang, JT; Choong, YM, 2004).

Debido a que el metanol es barato y es de fácil acceso, se ha utilizado en la elaboración de bebidas alcohólicas adulteradas y esto ha causado la muerte o la ceguera de mucha gente en países como China, Brasil, El Salvador, India, Taiwán, Colombia, entre otros (Wang, ML; Wang, JT; Choong, YM, 2004); pero el riesgo está tanto en las bebidas falsificadas como también en las fraudulentas (Ministerio de Salud y Protección social) por eso se han estudiado varios métodos para la evaluación de su calidad contemplando diferentes técnicas analíticas e instrumentales para determinar si una bebida es o no apta para el consumo humano, además por esta razón para el laboratorio de aguas y alimentos de la Universidad Tecnológica de Pereira es muy importante tener un método estandarizado para apoyar la evaluación de este riesgo en la población del eje cafetero tal es el caso de la cromatografía de gases que detecta los principales congéneres de las bebidas espirituosas potables (Kirk, Sawyer, & Egan, 2005).

3. Objetivos

3.1 Objetivo general

Estandarizar un método cromatográfico para la determinación de metanol, etanol y alcoholes superiores en bebidas espirituosas elaborado a escala basado en lo mencionado en la NTC 4118 para el Laboratorio de Análisis de Aguas y Alimentos de la Universidad Tecnológica de Pereira.

3.2 Objetivos específicos

- Estandarizar una técnica cromatográfica en la cual sea posible identificar y cuantificar el etanol, metanol y alcoholes superiores presentes en las bebidas espirituosas de interés (Brandy, ginebra, ron, vodka, whisky).
- Estandarizar las condiciones más adecuadas para el análisis cromatográfico como son: volumen y método de inyección, temperaturas en el puerto de inyección, horno y detectores, tipo de columna y detector, para el método en estudio.
- Evaluar la técnica de estándar interno para el análisis por cromatografía de gases.
- Estandarizar la técnica de cualificación y cuantificación de metanol, etanol y alcoholes superiores para bebidas espirituosas de acuerdo a lo enunciado en la Norma Técnica Colombiana NTC 4118 respecto a las variables: volumen y método

de inyección, temperaturas en el puerto de inyección, horno y detectores, tipo de columna y detector.

4. Marco teórico

4.1 Marco conceptual:

4.1.1 Bebidas espirituosas:

Las bebidas alcohólicas representan un importante porcentaje dentro de la economía de un país, pero presentan muchos problemas debido a la ilegalidad, estos no solo acarrea problemas económicos por la evasión de impuestos sino un problema de salud pública.

En cada país dichas bebidas deben de acogerse a unos parámetros de contenido alcohólico pero para el caso de Colombia solo se refiere en muchos casos al contenido de etanol y la sumatoria de todos los congéneres, en otros se citan las siglas PDO (*Protected designation of origin*), así son llamadas las bebidas cuando la legislación acepta los parámetros de calidad del lugar de origen, y GI (*geographical indication*), que en otros contextos de la Unión Europea se refieren a la indicación geográfica del producto a analizar. (Intoxicación por metanol-capítulo XII)

En las diferentes regulaciones nacionales de cada país se refieren a estas dividiéndolas en diferentes familias, de acuerdo a su grado alcohólico, el origen del alcohol entre otras. Para el caso de estudio se destaca la clasificación por proceso de obtención del producto, es así como la familia de bebidas espirituosas comprende el fermento de un carbohidrato procedente de una fruta, cereal, tubérculo o semilla, con posterior destilación hasta alcanzar contenidos etanólicos elevados y finalmente sometido a un tiempo de maduración (Aylott R. , 2013)

No todas las bebidas procedentes de un fermento hacen parte de las bebidas espirituosas un ejemplo de ello es la cerveza esto se debe a vario factores, en primer lugar el contenido alcohólico de una bebida espirituosa debe de ser mínimo 15%^v (Philp, 1986) por otra parte el proceso de ésta demanda tras su embotellado final una pasteurización para garantizar el control microbiológico que no se lleva a cabo en las bebidas destiladas ya que estas son microbiológicamente estables. (Aylott R. , 2013)

Las bebidas espirituosas varían entre si dependiendo de la proveniencia de la matriz fermentada, esta puede generar más o menos congéneres y alcoholes superiores, estos últimos en el proceso de maduración son oxidados obteniendo parcialmente ácidos carboxílicos y finalmente esteres que producen el sabor característico de cada bebida (Philp, 1986); otro factor determinante en su variedad se debe a la adición de aromas, material vegetal macerado, edulcorantes, azúcares u otros productos agrícolas, un ejemplo de ellos es la adición de bayas de enebro para la obtención de la ginebra, la adición de anís

para la producción del aguardiente entre otros.

La concentración de alcoholes superiores y congéneres en las bebidas espirituosas son variables y dependen directamente del tiempo de maduración, para la legislación colombiana se tiene cuantificados el contenido máximo de estos de manera conglomerada, solo detalla en la mayoría de los casos únicamente la concentración de etanol. El metanol hace parte de los congéneres, la presencia de este tiene dos límites por el riesgo que presenta para la salud, estos son: dosis letal (30- 240mL) y dosis tóxica (100 ppm). (Intoxicación por metanol-capítulo XII)

Las definiciones de bebidas alcohólicas se encuentran contempladas en las regulaciones nacionales (ver marco legal) y en su mayoría se refiere a las bebidas espirituosas, reflejando su relevancia a nivel nacional e internacional (Aylott R. , 2013)

4.1.2 Cromatografía de gases:

La cromatografía ha sido una técnica ampliamente estudiada y aplicada a lo largo de la historia. La primera persona que definió la técnica bajo el nombre de cromatografía fue el botánico ruso Miguel Tswett en 1906, dicha palabra proviene de las palabras griegas Khromtos (color) y graphos (escrito), esto se debe a que la primera aplicación que tuvo fue en la separación de pigmentos vegetales en bandas (Olguín & Rodríguez, 2004)

En la actualidad se han desarrollado técnicas variadas que tienen como fundamento la separación de compuestos, estas se dividen en dos grandes grupos:

- Cromatografía plana
 - Cromatografía de capa fina
 - Cromatografía de papel
- Cromatografía de columna
 - Cromatografía de gases
 - Cromatografía líquida
 - Cromatografía de fluidos súper críticos

A su vez cada una de ellas se subdivide dependiendo de la muestra que se va a tratar, la mayoría de estas técnicas evalúan la separación de compuestos incoloros, por lo cual es más adecuada a la definición de cromatografía como:

Cromatografía: Método utilizado para la separación de componentes de una muestra mediante la interacción química de estos con dos fases, una llamada fase estacionaria y la otra fase móvil. (Cromatografía de gases)

Fase estacionaria: Medio que está fijado física o químicamente a una superficie, este puede tener características específicas para analitos de interés como espesor de película,

polaridad, porosidad, longitud, entre otras. La muestra que se quiere separar pasa por medio de esta y según la afinidad que tenga cada uno de sus componentes se irán fijando a la fase estacionaria y de esta manera el mas a fin con esta se retendrá por mayor tiempo que el que el que tiene menor afinidad (Aylott R. , 2013)

Fase móvil: Esta es la encargada de ayudar a eluir (Extraer, mediante un líquido apropiado, una sustancia del medio sólido que la ha absorbido) el compuesto de la fase estacionaria.

Cromatografía de gases: Técnica de separación específicamente de compuestos volátiles, no termolábiles (compuestos que se puedan ver degradados por la temperatura. Por ejemplo los carbohidratos), por medio de columnas empacadas o capilares que contienen fases estacionarias selectivas, la elución de estas se lleva a cabo por medio de un gas inerte (tanto con la muestra como con la fase estacionaria), usualmente son utilizados gases nobles, Hidrógeno y Nitrógeno.

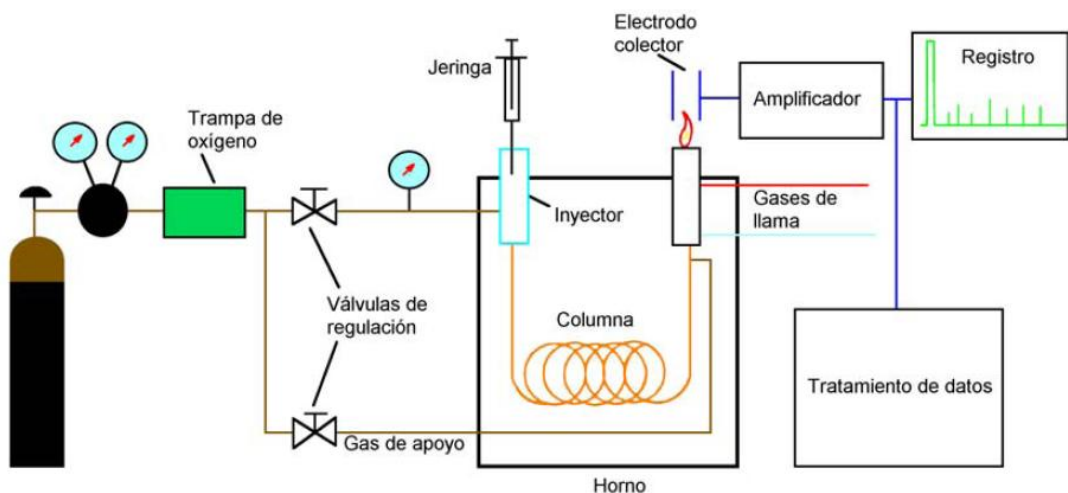


Figura 1. Diseño simplificado de un cromatógrafo de gases. (Cromatografía de gases)

La cromatografía de gases se divide en las siguientes zonas:

1. Zona neumática
2. Zona de inyección
3. Zona de horno (y/o columna)
4. Zona de detectores

1. Zona neumática:

La zona neumática está comprendida por todo el compendio de reguladores de presión y cilindros portadores de los gases con los que opera el cromatógrafo de gases.

Todas las conexiones que se realicen en esta zona se recomienda que sean en acero inoxidable ya que estas no reaccionan con los gases y no forman deposiciones de óxido, dichas tuberías se sugiere que tengan una forma de espiral o resorte para compensar la presión que se genera en su interior.

Los gases necesarios para el funcionamiento del equipo son:

Gas de arrastre, portador o carrier: Este es un gas inerte, no puede reaccionar ni con la muestra ni con la fase estacionaria de la columna, es el encargado de ayudar a eluir la muestra.

Gases para el funcionamiento de los detectores: Estos son los encargados de mantener encendidos y estables los detectores.

2. Zona de inyección:

Partes del puerto de inyección: Estas son las partes por las que se encuentra constituido el punto de entrada o inyección de las muestras

Septum: Sello en la entrada del puerto de inyección, este tiene como función tener la cámara hermética y evitar la pérdida de muestra.

Liner: Cilindro de vidrio desactivado encargado de contener la muestra mientras se volatiliza.

Cámara de atomización: Horno que contiene al liner, proporciona el calor necesario (programado por el analista) para volatilizar toda la muestra.

Tipos de inyección:

- **Split:** Flujo dividido, es recomendada para muestras concentradas debido a que esta brinda la posibilidad de programar el equipo para que solo un determinado porcentaje de la muestra ingrese a la columna y no la sature a ella o a los detectores.
- **Splitless:** Flujo sin división, es recomendada para muestras con bajas concentraciones del analito de interés, así se garantiza que toda la muestra se volatiliza y pasa a la columna.
- **On column:** En la columna, esta se realiza directamente en la cabeza de la columna, es utilizada en compuestos con presión de vapor elevado (volátiles).
- **Head space:** Espacio de cabeza, es utilizada para muestras con alta presión de vapor o análisis de los compuestos más volátiles de una muestra, solo se colectan los analitos presentes en el espacio libre del vial ya sea por absorción en membranas especiales (microextracción en fase sólida) o microjeringas.

3. Zona de Horno:

Las columnas se distinguen entre sí principalmente la diferente polaridad que depende de la composición de la fase estacionaria, también varían en longitud, diámetro de columna, espesor de película de fase estacionaria y soporte de fase estacionaria.

Columnas empacadas: Tiene como soporte de fase estacionaria microesferas que rellenan toda la columna, están bañadas de la fase estacionaria, tiene una menor longitud que las

columnas capilares y un mayor diámetro, pueden brindar una menor resolución que las capilares pero son utilizadas para análisis específicos como determinación de humedad.

Columnas capilares: La fase estacionaria se encuentra adherida física o químicamente a las paredes de la columna, tienen longitudes mayores y diámetros menores que las empacadas.

4. Zona de detectores:

Los equipos de cromatografía de gases se pueden equipar con detectores universales o selectivos, para el caso de estudio se trabajó con un detector de ionización de llama.

Detector de ionización de flama (FID): Se pueden detectar cadenas carbonadas C-H, el gas proveniente de la columna se mezcla con el hidrogeno, entra al detector donde se quema con exceso de aire seco, de allí pasa a una cámara polarizada que colecta los iones obtenidos , sobre este dispositivo se mide la corriente eléctrica desde el quemador hasta el colector (Cromatografía de gases)

En conclusión la cromatografía de gases brinda la posibilidad de analizar muestras (ver figura 1) , pueden tratarse de mezclas, siempre y cuando estas sean homogéneas, térmicamente estables, es decir, que no se degraden con la temperatura y que sean volátiles, para el caso de estudio se pueden determinar los alcoholes volátiles producto de la fermentación de las matrices, equipando el cromatógrafo de gases con una columna capilar es posible su determinación (Aylott R. , 2013), también se han visto buenos resultados con la aplicación de otras técnicas acopladas al cromatógrafo de gases, pero con la inyección splitless se han obtenido buen resultado.

4.1.3 Espectrometría infrarroja:

La espectroscopía es el estudio de la interacción entre la radiación emitida por una fuente de luz y la matriz o muestra en una longitud de onda determinada (ver figura 2). La espectrometría es la técnica para cuantificar y cualificar especies determinadas por medio del espectro de transmitancia o de absorbancia de ellas mismas. (Espectrometría). Esta se basa en que los enlaces químicos de las sustancias tienen frecuencias vibracionales específicas que corresponden a los niveles de energía de cada molécula.

El espectro infrarrojo es considerado la huella digital de un compuesto ya que este varía a causa de:

- Forma de la superficie de energía potencial de la molécula
- Geometría de la molécula
- Masa atómica

De ninguna manera con concentración o con condiciones de temperatura (si es termoestable) (Espectrometría infrarroja).La espectrometría infrarroja es el estudio de la espectrometría en la región infrarroja del espectro electromagnético que comprende Infrarrojo cercano (780nm – 3µm), infrarrojo medio (3 – 5 µm), infrarrojo lejano (5µm –

1mm), es conocida como una técnica no destructiva y demasiado eficiente por el tiempo de análisis requerido.

Es posible determinar la composición atómica de una molécula desde el espectro infrarrojo, en este se encuentra la presencia o ausencia de grupos funcionales, tipos de enlaces y movimientos vibracionales. De allí que se pueden inferir las estructuras moleculares. Además la altura de las señales es proporcional a la concentración así que es posible realizar cualificación y cuantificación por medio de esta técnica (Gonzáles, 2003)

Espectrómetro Infrarrojo con transformada de Fourier:

Es un instrumento constan principalmente de tres elementos básicos que son: Una fuente luminosa, un detector y un interferómetro de Michelson, este último es el encargado de modular la longitud de onda infrarroja, permitiendo de esta manera que todas las longitudes de onda alcancen el detector durante el tiempo de medida. (Gonzáles, 2003) (Gómez & Murillo)

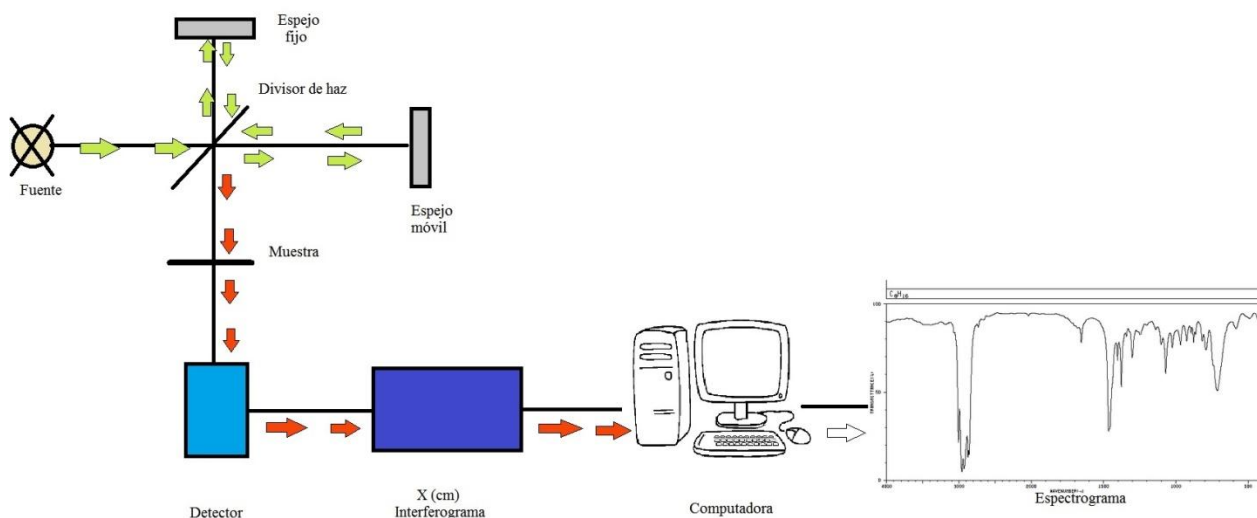


Figura 2.Diagrama simplificado de un espectrómetro Infrarrojo con transformada de Fourier

El funcionamiento como se muestra en la figura 2. se basa en el haz colimado proveniente por una fuente capaz de emitir toda la región infrarroja, el haz es dividido en dos señales con la misma energía de manera perpendicular, uno choca contra un espejo fijo y la otro choca contra un espejo móvil, ambas son reflejadas hacia el Divisor de luz, allí son recombinadas (Flechas naranjas), de esta manera se produce una interferencia que puede ser constructiva o destructiva, esto depende de la posición de los espejos.

El haz de luz recombinado choca contra la muestra, en ella se ocasionan los fenómenos vibracionales que dan lugar a la absorción de la señal incidente, de esta manera el haz transmitido llega al detector y posteriormente a el interferograma, este es el encargado de recibir las señales de todas las longitudes de onda del espectro, y gracias a él es posible

tener el espectro con una excelente resolución en tiempos más cortos.

Las ventajas de los espectrómetros con transformada de Fourier frente a los dispersivos son:

- Menores tiempos de análisis.
- Mayor radiación es recibida por el detector ya que no cuenta con rendijas que filtren la energía.
- La muestra no se encuentra inmediatamente después de la fuente así que si se trata de compuestos volátiles se reduce este factor debido a que se calienta mucho menos la muestra.
- No es necesario trabajar en condiciones especiales de luz.

4.2 Marco legal:

4.2.1 Definiciones legales generales:

Grados alcoholimétricos: Porcentaje en volumen de alcohol etílico a 20 grados centígrados.

Sustancias volátiles o congéneres: Se consideran sustancias volátiles o congéneres de las bebidas alcohólicas destiladas a los compuestos naturales volátiles tales como: acidez volátil, aldehídos, furfural, ésteres y alcoholes superiores excluyendo los alcoholes etílico y metílico.

Los alcoholes potables: Preparados alcohólicos, destilados, licores y bebidas alcohólicas a granel y otros, que no estén sujetos a requisitos específicos sobre la materia, deberán contener las sustancias volátiles o congéneres en mayor cantidad a las exigidas para cada uno de los productos terminados que se utilicen como materia prima, conforme a lo establecido en el presente Decreto, expresadas en mg/dm^3 de alcohol anhidro.

Alcohol: Es el etanol o alcohol etílico procedente de la destilación del producto resultante de la fermentación alcohólica de mostos adecuados.

Alcohol puro o extranjero: Es el que ha sido sometido a un proceso de rectificación de manera que su contenido total de impurezas sea inferior a 35 mg/dm^3 de alcohol anhidro y cuya destilación se ha efectuado a no menos de 96 grados alcoholimétricos.

Alcohol rectificado neutro: Es el sometido a un proceso de rectificación que tiene un contenido de impurezas inferior o igual a 80 mg/dm^3 de alcohol anhidro, y cuya destilación se ha efectuado a no menos de 95 grados alcoholimétricos.

Alcohol rectificado corriente: Es aquel que aun cuando se haya sometido a un proceso de rectificación tiene un contenido de impurezas entre 80 y 500 mg/dm^3 de alcohol anhidro,

cuya destilación se ha efectuado a no menos de 90 grados alcoholimétricos.

Bebida alcohólica: El producto apto para consumo humano que contiene una concentración no inferior a 2.5 grados alcoholiméricos y no tiene indicaciones terapéuticas. (Diario Oficial N° 41.220, 1994)

Bebida alcohólica alterada: Es toda bebida alcohólica:

- Que ha sufrido transformaciones totales o parciales en sus características fisicoquímicas, microbiológicas u organolépticas por causa de agentes físicos, químicos o biológicos.
- A la cual se le han sustituido total o parcialmente sus componentes principales reemplazándolos o no, por otras sustancias.
- Que ha sido adicionada de sustancias, no autorizadas.
- Que ha sido sometida a tratamientos que simulen, oculten o modifiquen sus características originales.
- Que ha sido adicionada de sustancias extrañas a su composición.

Bebida alcohólica fraudulenta: Es aquella:

- Con la apariencia y características generales de la oficialmente aprobada y que no procede de los verdaderos fabricantes.
- Que se designa o expide con nombre o calificativo distinto al que le corresponde.
- Que se denomina como el producto oficialmente aprobado, sin serlo.
- Cuyo envase, empaque o rótulo contiene diseño o declaraciones, que puedan inducir a engaño respecto de su composición u origen.
- Elaborada por un establecimiento, que no haya obtenido licencia sanitaria de funcionamiento.
- Que no posea registro sanitario.
- Que sea importada, sin el lleno de los requisitos señalados por el Ministerio de Salud.
- Que no cumpla con los requisitos técnicos exigidos en este Decreto y en las reglamentaciones posteriores expedidas por el Ministerio de Salud para cada tipo de producto. (Diario Oficial No 36.388, 1983)

4.2.2 Definición de bebidas:

Aguardiente: Es el producto proveniente de la destilación especial de mostos fermentados tales como vinos, sidra o bien de zumos de frutas, jarabes, jugos o caldos de granos o de otros productos vegetales previamente fermentados, se caracteriza por conservar un aroma y un gusto particulares inherentes a las sustancias sometidas a fermentación y destilación. Pueden realizarse ligeras correcciones de color únicamente con caramelo.

En Colombia se da denominación de aguardiente al licor anisado que se obtiene destilando

una maceración de semillas de anís (común, estrellado o su mezcla) adicionado o no de otras sustancias aromáticas en alcohol rectificado neutro, o mezclando alcohol rectificado neutro con agentes aromáticos seguido o no de la destilación, adicionado o no de otras sustancias aromáticas, edulcorantes o colorantes permitidos".

Whisky o whiskey: Es el aguardiente obtenido de la destilación especial de mostos fermentados, hasta máximo 75 grados alcoholimétricos, provenientes de malta o de cereales o de la mezcla de los dos, adicionado o no de alcohol extraneutro en una proporción no mayor del 25% en relación al grado alcohólico del producto terminado. Esta bebida deberá contener como mínimo de congéneres 1.500 mg/dm^3 , como resultado de la sumatoria de (acidez volátil, aldehídos, furfural, ésteres y alcoholes superiores) expresados en alcohol anhidro y su contenido máximo de metanol no podrá ser superior a 300 mg/dm^3 de alcohol anhidro, al igual que el contenido de furfural no podrá exceder a 10 mg/dm^3 , de alcohol anhidro, el máximo de cobre permitido expresado como Cu será 1 mg/dm^3 , el máximo de hierro permitido como Fe será 8 mg/dm^3 . Queda prohibida la adición directa de congéneres para regular su contenido.

El añejamiento no debe ser inferior a tres (3) años en recipientes de roble en tal forma que al final posea el gusto y el aroma que le son característicos.

Queda prohibida cualquier práctica física o química tendiente a acelerar, sustituir, imitar o simular el añejamiento natural en recipientes de roble, sólo se permitirá aumentar la superficie de contacto entre el producto a añejar y el recipiente de roble.

Tendrá una graduación final entre 38 y 45 grados alcoholimétricos.

Brandy: Es el aguardiente obtenido de la destilación especial hasta un máximo de 75 grados alcoholimétricos de vino o mezcla de ellos entre sí, o de holandas, aguardientes o destilados de vinos o de sus mezclas, adicionado o no de alcohol extraneutro en una proporción no mayor de 25% en relación al grado alcohólico del producto terminado.

Esta bebida deberá contener como mínimo congéneres de mg/dm^3 . El añejamiento no deberá ser inferior a un 81) año en recipientes de roble o por el sistema de "solera" en tal forma que al final posea el gusto y el aroma que le son característicos.

Queda prohibida toda práctica física o química tendiente a acelerar, sustituir, simular o imitar el añejamiento natural en recipientes de roble, sólo se permitirá aumentar la superficie de contacto entre el producto a añejar y el recipiente de roble.

Tendrá una graduación final entre 35 y 45 grados alcoholimétricos.

Ron: Es el aguardiente obtenido por destilación especial de mostos fermentados de zumo de la caña de azúcar, sus derivados o subproductos, añejados por un tiempo adecuado, de acuerdo con su clasificación en recipientes de roble en tal forma que al final posea el gusto y el aroma que le son característicos. También puede obtenerse por mezclas de rones entre

sí.

Esta bebida deberá contener como mínimo de congéneres 250 mg/dm^3 , como resultado de la sumatoria de (acidez volátil, aldehídos, furfural, ésteres y alcoholes superiores) expresados en alcohol anhidro y su contenido máximo de metanol no podrá ser superior a 300 mg/dm^3 de alcohol anhidro, al igual que el contenido de furfural no podrá exceder a 10 mg/dm^3 , de alcohol anhidro, el máximo de cobre permitido expresado como Cu será 1 mg/dm^3 , el máximo de hierro permitido expresado como Fe será 8 mg/dm^3 . Queda prohibida la adición directa de congéneres para regular su contenido.

Tendrá una graduación alcoholimétrica entre 35 y 48 grados alcoholimétricos.

Vodka: Es el aguardiente rectificado a 95 grados alcoholimétricos o más, reducido luego a un grado no menor de 40 ni mayor de 55 grados alcoholimétricos y tratado por un método conveniente de manera que quede sin carácter, aroma o gusto definitivo. Esta bebida deberá contener como máximo de congéneres de 90 mg/dm^3 , de alcohol anhidro, y no podrá contener más 100 mg/dm^3 , de metanol expresados en alcohol anhidro, el máximo de cobre permitido expresado como Cu será de 1 mg/dm^3 , el máximo de hierro permitido expresado en Fe será de 8 mg/dm^3 , el contenido de furfural no debe ser detectable.

Ginebra: Es el aguardiente obtenido por destilación y rectificación de un mosto fermentado, posteriormente redestilado en presencia de bayas de enebro (*Uniperos* comunis) y otras especies aromáticas utilizadas en la elaboración de dicho producto. Tendrá una graduación entre 39 y 50 grados alcoholimétricos. Esta bebida deberá tener como máximo de congéneres de 120 mg/dm^3 , de alcohol anhidro, y no podrá contener más de 100 mg/dm^3 , de metanol expresados en alcohol anhidro, el máximo de cobre permitido expresado en Cu será de 1 mg/dm^3 , el máximo de hierro permitido expresado en Fe será de 8 mg/dm^3 , el contenido de furfural no debe ser detectable. (Diario Oficial N° 41.220, 1994)

5. Metodología

5.1 Análisis con curvas de calibración por cromatografía de gases:

Es frecuente en el análisis instrumental la construcción de curvas de calibración para cuantificación y cualificación de compuestos. Para el caso de estudio se establece este como método de curvas de calibración

5.1.1 Materiales y equipos:

5.1.1.1 Reactivos:

- Metanol HPLC

- Etanol Absoluto
 - Isopropanol HPLC
 - Propanol HPLC
 - n-butanol HPLC
 - 2-butanol HPLC
 - Isobutanol HPLC
 - 2-metil-1-butanol HPLC
 - Agua des ionizada o destilada
-

5.1.1.2 Equipos:

- Cromatógrafo de gases marca Shimadzu modelo GC-2014 (Detector de Ionización de llama)
- Auto-inyector AOC-20i acoplado al cromatógrafo de gases
- Auto-muestreador AOC-20s acoplado al cromatógrafo de gases
- Columna capilar RXT-1701
- Suministro de hidrogeno, aire seco y helio de alta calidad, libres de impurezas, partículas y humedad.
- Balanza analítica con precisión de 0,0001g
- Micropipetas de 1-10 μ L y 100-1000 μ L
- Equipo de destilación por corriente de vapor.

5.1.1.3 Material de laboratorio:

- Viales aforados con tapa y septum de 2mL
- Matraz aforado de 20mL
- Pipetas aforadas y volumétricas de 50,5,2,1mL
- Puntas para micropipeta de 1-10 μ L y 100-1000 μ L

5.1.2 Preparación de muestras patrones:

Se prepararon tres curvas individuales, las cuales fueron: etanol, metanol y alcoholes superiores, a continuación se presenta la composición de cada muestra.

Se realizaron 5 curvas de cada una en tres días diferentes para realizar la estandarización, en ellas se establecieron rangos en los cuales se esperaba cuantificar los analitos de interés. Los volúmenes que se tomaron para su preparación se encuentran en las tablas 1 a 3.

Tabla 1.Preparación de la curva de etanol en agua como solvente

Etanol		
%	Volumen de etanol (μL)	Volumen de agua (μL)
5	50	950
15	150	850
25	250	750
35	350	650
55	550	450
65	650	350
80	800	200

Tabla 2. Preparación de la curva de metanol en agua como solvente

Metanol		
%	Volumen de metanol (μL)	Volumen de agua (μL)
1	10	990
5	50	950
10	100	900
20	200	800
40	400	600
60	600	400
80	800	200

Tabla 3. Preparación de la curva de alcoholes superiores en agua como solvente

Alcoholes superiores (AS)		
%	Volumen de cada AS (μL)	Volumen de agua (μL)
1	10	940
2	20	880
3	30	820
4	40	760
5	50	700
10	100	400
15	150	100

5.1.3 Preparación de muestras:

Las bebidas espirituosas o bebidas alcohólicas, son matrices medianamente complejas que por su composición no es recomendable su análisis directo en el cromatógrafo de gases ya

que existen componentes termolábiles que pueden obstruir el puerto de inyección, columna u producir alguna avería en el detector ocasionándole una pérdida de sensibilidad. Por todo lo anterior es necesario realizarle un tratamiento previo a la muestra, este consiste en destilarla en el equipo de arrastre de vapor, con un 10 % de vapor durante 5 minutos, el destilado es llevado a un balón de 20 mL y se afora. Finalmente es inyectado al cromatógrafo de gases.

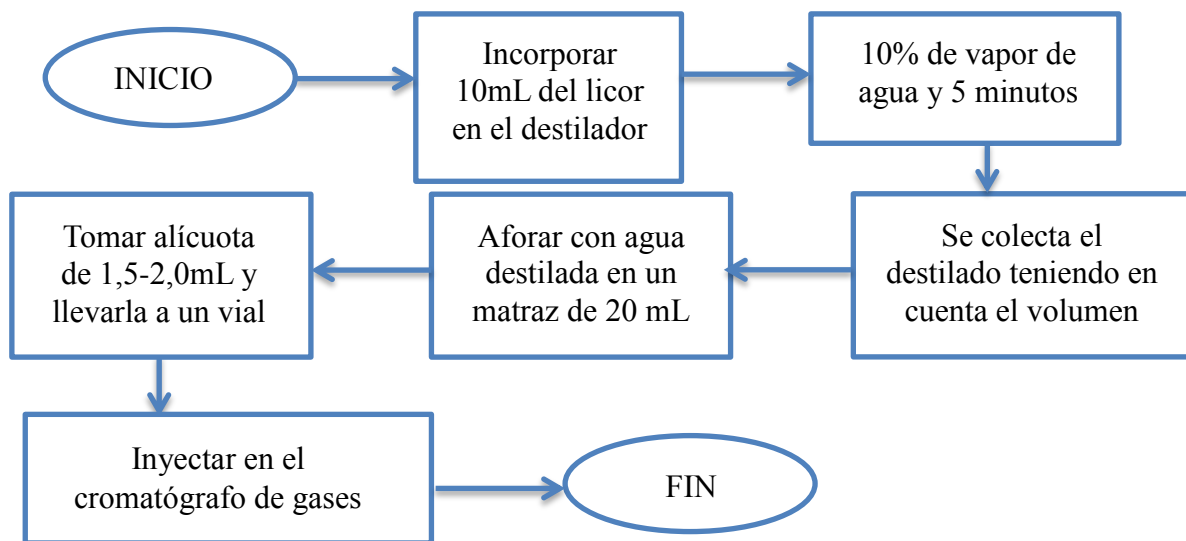


Figura 3.Proceso de destilación para muestras de licores.

5.1.4 Condiciones cromatográficas:

Tabla 4 Condiciones cromatográficos para el método de curvas de calibración.

Puerto de inyección	
Volumen de inyección	0,2 µL
Temperatura	250 °C
Modo de inyección	Split
Horno	
Columna	RXT 1701
	30 m, 0.32 mm ID, 0.25 µm
	crossbonded 14% cyanopropylphenyl, 86% dimethylpolysiloxane

Gas de arrastre	Helio	
Temperatura		
r= °C/min	Temperatura (°C)	Tiempo (min)
	40	0
6	171	0
30	215	0
25	280	0
Detectores		
Detector de ionización de llama	FID	
Temperatura	280°C	

5.2 Análisis mediante la aplicación de la NTC 4118 por cromatografía de gases:

Siguiendo los parámetros establecidos por la NTC 4118, se prepararon e inyectaron una serie de muestras, que posteriormente fueron analizadas con el sistema de ecuaciones planteado por la misma norma.

5.2.1 Materiales y equipos:

5.2.1.1 Reactivos:

- Metanol HPLC
 - Isopropanol HPLC
 - Propanol HPLC
 - 2-butanol HPLC
 - Isobutanol HPLC
 - 2-metil-1-butanol HPLC
 - n-butanol HPLC (Estándar interno IS)
 - Etanol Absoluto
 - Agua des ionizada o destilada
- } Analitos
- } Solventes

5.2.1.2 Equipos:

- Cromatógrafo de gases marca Shimadzu modelo GC-2014 (Detector de Ionización de llama)
- Auto-inyector AOC-20i acoplado al cromatógrafo de gases
- Auto-muestreador AOC-20s acoplado al cromatógrafo de gases
- Columna capilar RXT-1701
- Suministro de hidrogeno, aire seco y helio de alta calidad, libres de impurezas, partículas y humedad.

- Balanza analítica con precisión de 0,0001g
- Micropipetas de 1-10 μ L y 100-1000 μ L
- Equipo de destilación por corriente de vapor.

5.2.1.3 Material de laboratorio:

- Viales aforados con tapa y septum de 2mL
- Matraz aforado de 200, 20 y 5mL
- Pipetas aforadas y volumétricas de 50,5,2,1mL
- Puntas para micropipeta de 1-10 μ L y 100-1000 μ L

5.2.2 Preparación de soluciones:

Para esta metodología es necesario tomar todos los pesos de los compuestos adicionados, ya que son necesarios para realizar los cálculos finales de composición. Es necesario resaltar que esta metodología está basada en las directrices de la NTC 4118 pero se realizó a escala.

• Solución A: "Solución estándar de partida"

Esta contiene todos los analitos de interés, excepto el estándar interno.

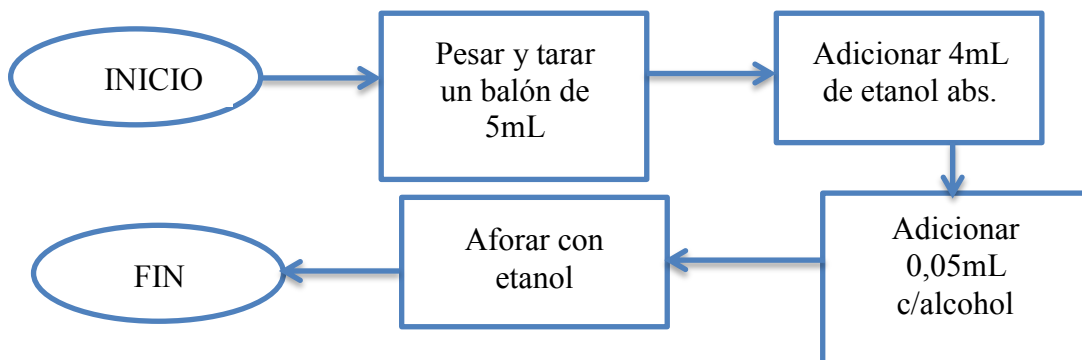


Figura 4. Preparación de la solución estándar de partida

• Solución B: "Solución estándar de partida de estándar interno"

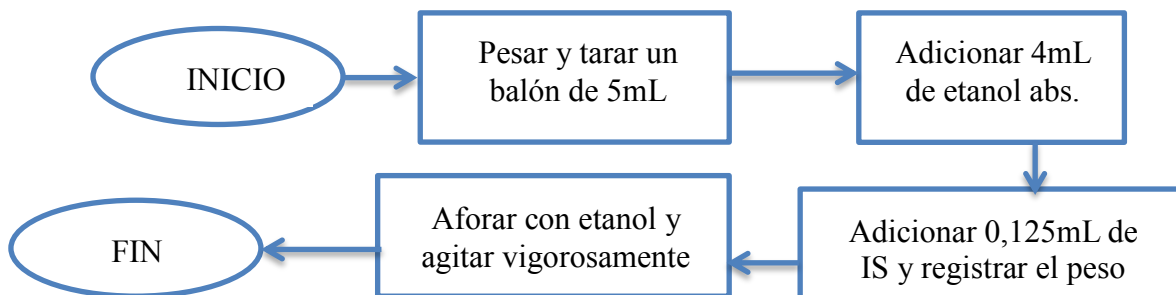


Figura 5. Preparación de la solución estándar de partida de estándar interno

- **Solución C: "Solución estándar de trabajo de los factores de respuesta RF"**

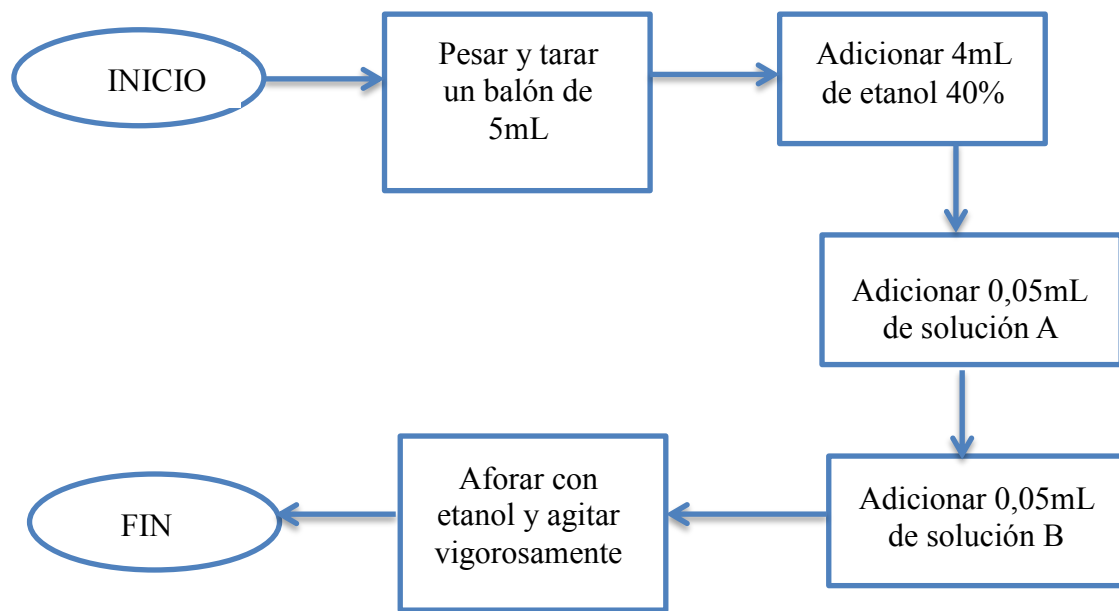


Figura 6. Preparación de la solución estándar de trabajo de los factores de respuesta RF

- **Solución D: "Solución de trabajo del estándar interno"**

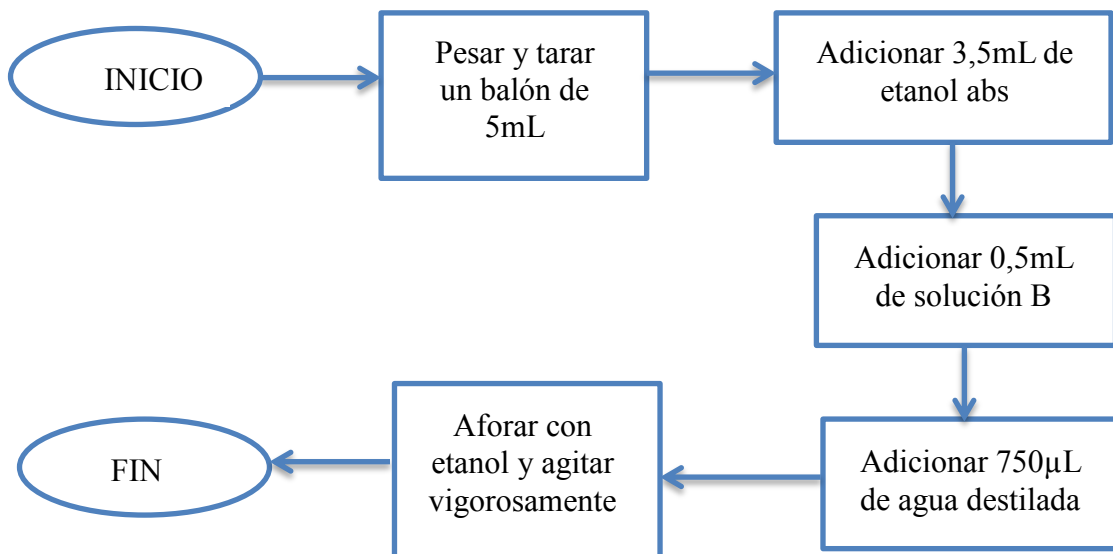
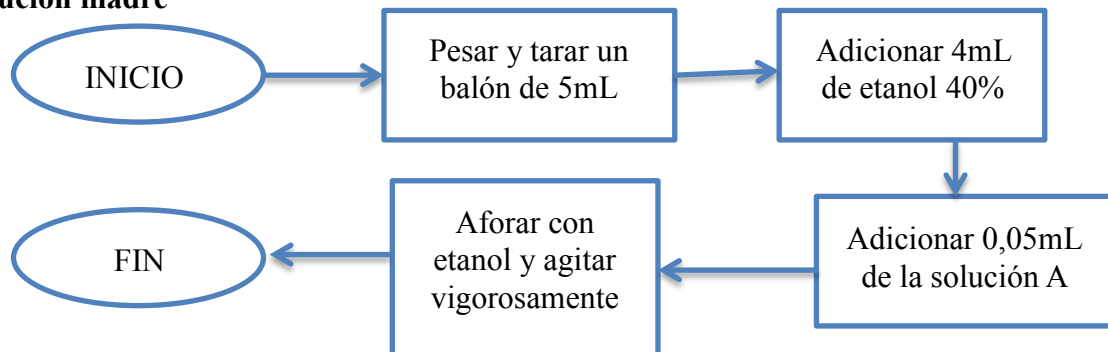


Figura 7. Preparación de la solución de trabajo del estándar interno

- **Solución CC: "Solución estándar de control de calidad"**

Solución madre



Solución de trabajo

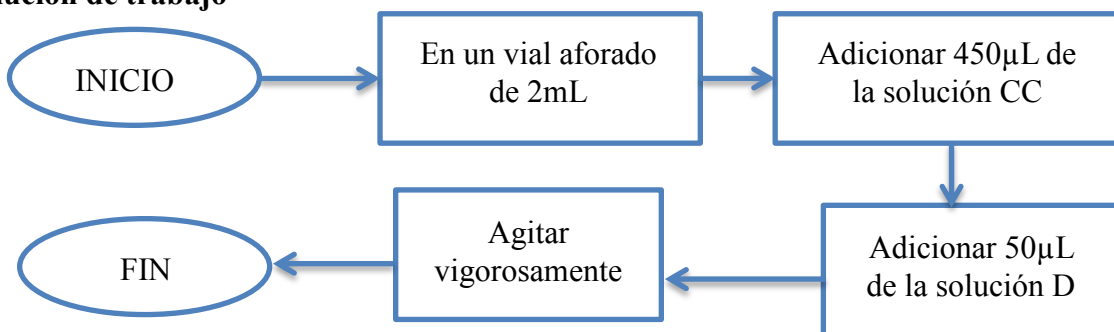


Figura 8. Preparación de la solución estándar de control de calidad

5.2.3 Preparación de muestras:

Las muestras a analizar como para el método de curvas de calibración es necesario destilarlas, estas se sometieron a las mismas condiciones que para el método de curvas de calibración. Finalmente se toma una alícuota de 450µL del destilado en un vial, donde se adicionan 50µL de la solución D y se procede a inyectar en el cromatógrafo de gases.

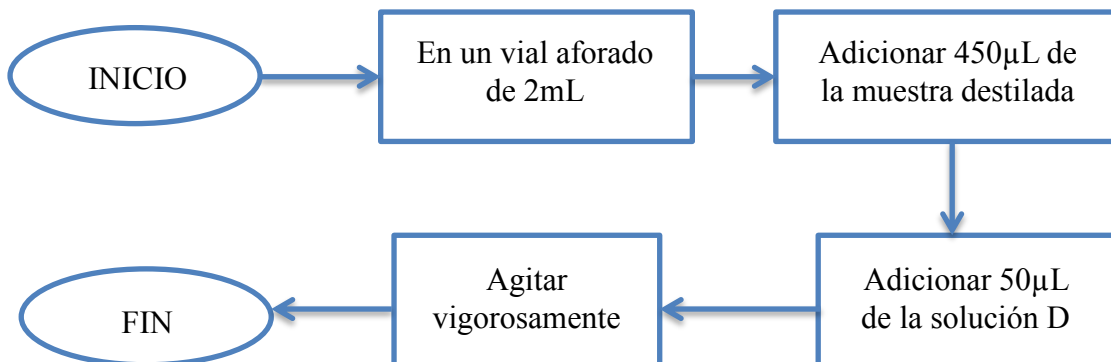


Figura 9. Preparación de la muestras de licor de interés.

5.2.4 Condiciones cromatográficas:

Tabla 5. Condiciones cromatográficas para la metodología planteada por la NTC 4118

Puerto de inyección		
Volumen de inyección	0,2 µL	
Temperatura	250 °C	
Modo de inyección	Split	
Horno		
Columna	RXT 1701	
	30 m, 0.32 mm ID, 0.25 µm	
	crossbonded 14% cyanopropylphenyl, 86% dimethylpolysiloxane	
Gas de arrastre	Helio	
Temperatura		
r= °C/min	Temperatura (°C)	Tiempo (min)
	40	0
6	171	0
30	215	0
25	280	0
Detectores		
Detector de ionización de llama	FID	
Temperatura	280°C	

5.3 Análisis mediante espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier:

En la actualidad las ciencias instrumentales cruzan diferentes técnicas con el fin de tener unos resultados más confiables, para el caso de estudio se tuvieron en cuenta solo dos analitos, ya que eran los que estaban presentes en mayor proporción, siguiendo la metodología de curvas de calibración de elaboración de curvas de calibración.

5.3.1 Materiales y equipos:

5.3.1.1 Reactivos:

- Metanol HPLC
 - Etanol Absoluto
 - Agua des ionizada o destilada (Solvente)
- } Analitos

5.3.1.2 Equipos:

- Equipo de espectroscopia infrarroja modelo Cary 630-FTIR
- Balanza analítica con precisión de 0,0001g
- Micropipetas de 1-10 μ L y 100-1000 μ L
- Equipo de destilación por corriente de vapor.

5.3.1.3 Material de laboratorio:

- Viales aforados con tapa y septum de 2mL
- Matraz aforado de 20mL
- Pipetas aforadas y volumétricas de 50,5,2,1mL
- Puntas para micropipeta de 1-10 μ L y 100-1000 μ L

5.3.2 Preparación de muestras patrones:

Se prepararon dos curvas individuales, las cuales fueron: etanol y metanol. A continuación se presenta la composición de cada muestra.

Se realizaron 5 curvas de cada una en tres días diferentes para realizar la estandarización, en ellas se establecieron rangos en los cuales se esperaba cuantificar los analitos de interés, estas se encuentran descritas en las tablas 6 y 7.

Tabla 6.Preparación de la curva de etanol en agua como solvente

Etanol		
%	Volumen de etanol (μ L)	Volumen de agua (μ L)
5	50	950
15	150	850
25	250	750
35	350	650
55	550	450
65	650	350
80	800	200

Tabla 7. Preparación de la curva de metanol en agua como solvente

Metanol		
%	Volumen de metanol (μ L)	Volumen de agua (μ L)
1	10	990
5	50	950

Metanol		
%	Volumen de metanol (μL)	Volumen de agua (μL)
10	100	900
20	200	800
40	400	600
60	600	400
80	800	200

5.3.3 Preparación de muestras:

Las bebidas espirituosas o bebidas alcohólicas, son matrices medianamente complejas y por la variedad de componentes que contiene puede enmascarar señales de interés. Para reducir interferencias es necesario realizar un tratamiento previo a la muestra, este consiste en destilarla en el equipo de arrastre de vapor, con un 10 % de vapor durante 5 minutos, el destilado es llevado a un balón de 20 mL y se afora. Finalmente es llevado al equipo de Espectroscopia infrarroja para su lectura.

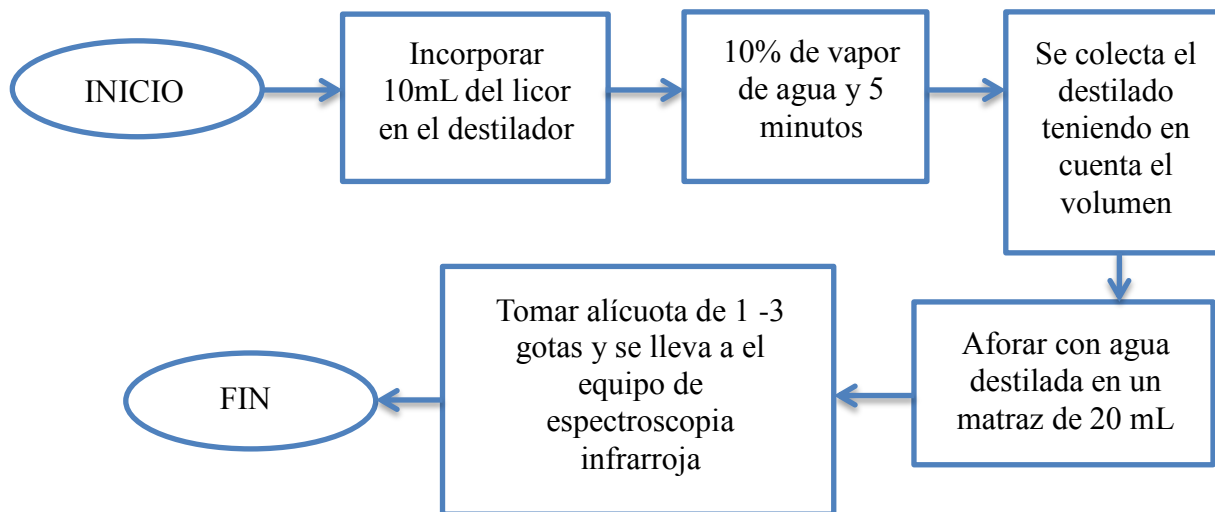


Figura 10. Proceso de destilación para muestras de licores.

5.3.4 Condiciones del equipo de Espectroscopia infrarroja:

Tabla 8. Condiciones del FTIR para el método de curvas de calibración.

Rango espectral (cm^{-1})	4000-650
Barridos de fondo	26
Barridos de muestra	26
Resolución (cm^{-1})	4
Método	Pathlength_ATR

6. Resultados y análisis

Se aplicaron dos técnicas diferentes cromatografía de gases (GC) y espectroscopia infrarroja (FT-IR), para la primera se realizaron dos metodologías de trabajo y para la segunda solo una debido al alcance de cada técnica.

6.1 Análisis con curvas de calibración por cromatografía de gases:

Para este análisis de curvas de calibración se llevan a cabo una serie de curvas de calibración con los analitos de interés, para el caso particular se realizan series de cinco repeticiones diarias durante tres días.

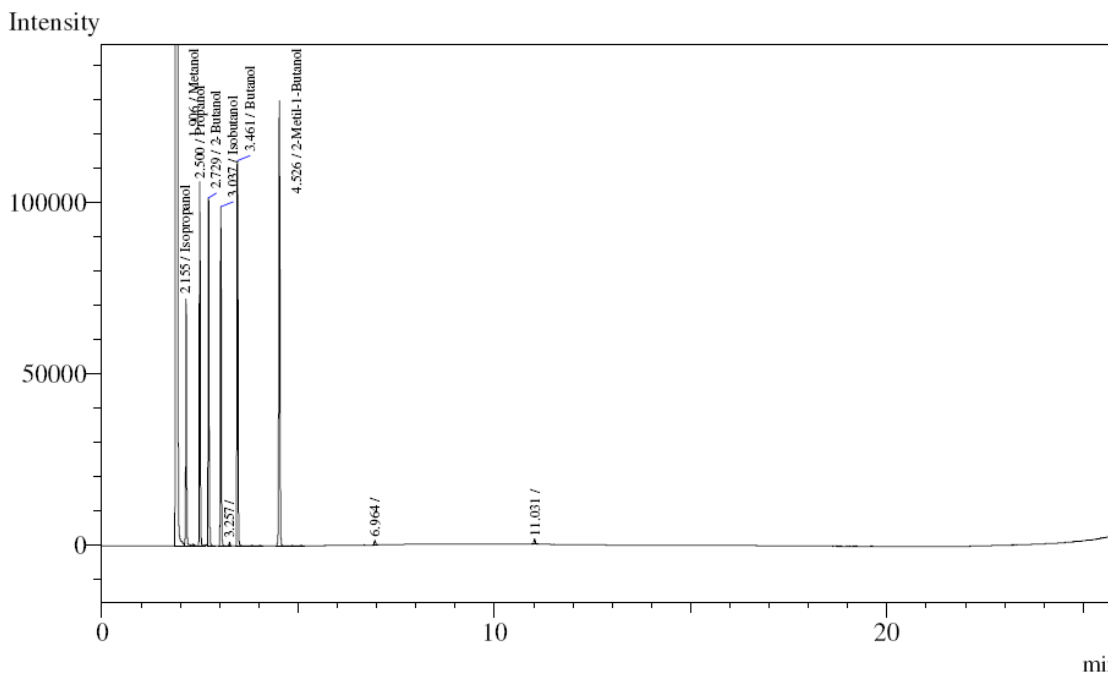


Figura 11. Cromatograma de mezcla de alcoholes al 1% por la metodología de curvas de

calibración.

Mediante el análisis con curvas de calibración se obtienen picos de sustancias que se encuentran a la misma concentración pero varían en área o altura (ver figura 11) por la estereoquímica de cada molécula, para efectos de análisis se establecieron las mismas condiciones de inyección (volumen de inyección, temperaturas en el puerto de inyección, horno y detectores, entre otros) que lo establecido en la NTC 4118, pero se puede acortar a un análisis de 5 minutos teniendo una buena resolución del cromatograma.

6.1.1 Parámetros estadísticos generales:

Tabla 9. Resultados obtenidos para el día 1 de la curva de etanol.

Numero de pico	Tiempo de retencion	Área	Altura	% Experimental	Nombre del compuesto	Nombre de la muestra	% Teórico	Repeticion
1	2,051	7653242	3150011	80%	Etanol	EtOH5	80%	1
1	2,048	7657767	2463808	80%	Etanol	EtOH4	80%	1
1	2,048	7646289	2404832	80%	Etanol	EtOH3	80%	1
1	2,048	7624877	3819637	81%	Etanol	EtOH	80%	1
1	2,048	7657767	2414732	80%	Etanol	EtOH2	80%	1
1	2,047	6188490	4145183	65%	Etanol	EtOH5	65%	1
1	2,048	6176781	2444776	64%	Etanol	EtOH4	65%	1
1	2,057	6128426	3911718	65%	Etanol	EtOH3	65%	1
2	2,057	6177626	4238446	64%	Etanol	EtOH2	65%	1
1	2,047	6170539	3404363	66%	Etanol	EtOH	65%	1
1	2,048	5200224	1986355	55%	Etanol	EtOH5	55%	1
1	2,045	5256403	1828491	56%	Etanol	EtOH4	55%	1
1	2,056	5223097	3736770	55%	Etanol	EtOH2	55%	1
1	2,044	5278884	2591138	55%	Etanol	EtOH	55%	1
1	2,045	5256463	1828491	56%	Etanol	EtOH3	55%	1
1	2,045	3350058	1135797	35%	Etanol	EtOH5	35%	1
1	2,042	3336581	879913	37%	Etanol	EtOH4	35%	1
2	2,051	3383448	2539981	36%	Etanol	EtOH2	35%	1
1	2,041	3300778	1627483	35%	Etanol	EtOH	35%	1
1	2,045	3350058	1135797	35%	Etanol	EtOH3	35%	1
1	2,045	1857031	954098	25%	Etanol	EtOH5	25%	1
1	2,042	1816689	780559	24%	Etanol	EtOH4	25%	1
2	2,047	1835032	1196264	25%	Etanol	EtOH2	25%	1
1	2,039	1838203	969438	22%	Etanol	EtOH	25%	1
1	2,046	1858731	1425386	24%	Etanol	EtOH3	25%	1
1	2,039	354409	227012	8%	Etanol	EtOH	5%	1
1	2,042	173877	113615	6%	Etanol	EtOH5	5%	1
1	2,042	223092	144387	5%	Etanol	EtOH4	5%	1
2	2,046	441962	289585	4%	Etanol	EtOH	5%	1
2	2,045	487691	303412	4%	Etanol	EtOH3	5%	1

En la anterior tabla se pueden observar nueve columnas en las cuales se presenta la información recopilada de las muestras inyectadas en el día 1 de análisis, entre ellas se encuentra:

- Número de pico, este corresponde a la posición de la señal dentro del cromatograma, por lo general se refiere al mismo número ya que no se está variando la matriz de inyección pero se puede deber a ruido producido por el equipo que interpreto como un pico cromatográfico.
- Tiempo de retención, es el tiempo que tarda cada sustancia dentro de la columna cromatográfica en ser retenida debido a las interacciones físicas y/o químicas de la fase estacionaria que permiten su debida separación.
- Área, el software del GC 2014 llamado GC solutions cuenta con un sistema de integración automático que permite conocer las áreas de los picos de interés.
- Altura, al igual que la altura corresponden a la concentración de analito en la matriz analizada; en equipos anteriores los datos no podían ser analizados desde un software sino que estos eran impresos a la medida que se recibía la señal, estos presentaban la altura de los picos cromatográficos en centímetros o milímetros, con la tecnología actual se presentan en unidades de voltaje ya que es percibida como una señal eléctrica.
- % Experimental, es la concentración de analito encontrada en la muestra.
- Nombre del compuesto, es la identificación según la IUPAC para cada analito analizado.
- Nombre de la muestra, rotulo establecido por el analista para identificar la muestra.
- % Teórico, es la concentración de analito teóricamente.
- Repetición, corresponde a el día de análisis.

Tabla 10. Parámetros estadísticos para el etanol 5% en cada día de análisis.

Etanol 5%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0151	0,0074	0,0072
Promedio	5,27%	5,92%	4,63%
Precisión	0,2862	0,1257	0,1542
Exactitud	94,73%	94,08%	95,37%
Límite de cuantificación	0,1509	0,0744	0,0715
Límite de Detección	0,0453	0,0223	0,0214

Para el caso del etanol de manera general se encuentra que la desviación estándar, es decir, la dispersión de los datos para cada concentración en la curva es muy baja, eso quiere decir que los puntos no están dispersos o lo están levemente.

La precisión fue determinada por el coeficiente de varianza, y esta es, a manera general es $< 0,3$, es decir que para cada punto la concentración es aproximadamente $\pm 0,3$.

La exactitud es medida mediante el % de error ya que es la dispersión que existe entre el valor el valor obtenido y el valor de referencia, para el etanol en todos sus puntos tienen una exactitud mayor al 87%.

El límite de cuantificación debido a que es una técnica donde la señal del blanco es equivalente a cero se tomó como 10 veces la desviación estándar, se tiene entonces que el límite de cuantificación es 0,17%.

El límite de detección por su parte se obtuvo a partir de 3 veces la desviación estándar, el límite de detección para el etanol es de 0,05%.

6.1.2 Análisis multivariado:

6.1.2.1 Estimación lineal:

Tabla 11. Estimación lineal para el etanol en los 3 días de análisis.

Día 1				Día 2				Día 3			
Estimación lineal											
b	1,00219E-07	0,031485404	a	b	9,9737E-08	0,032525561	a	b	9,94101E-08	0,035069932	a
sb	1,29599E-09	0,006064891	sa	sb	1,47525E-09	0,007026677	sa	sb	1,21961E-09	0,005728638	sa
r^2	0,995505143	0,017245209	sy/x	r^2	0,99434375	0,01887338	sy/x	r^2	0,995952549	0,016404333	sy/x
F	5979,865196	27	dF	F	4570,685223	26	dF	F	6643,864793	27	dF
ssrg	1,77839543	0,008029726	ssres	ssrg	1,62809859	0,009261317	ssres	ssrg	1,787878208	0,007265758	ssres

En la tabla 8, se encuentra la estimación lineal para los tres días de análisis, en esta se encuentra la información de la ecuación que modela el comportamiento de cada día, conociendo que dicha ecuación es:

Ecuación 1. Ecuación general de la recta

$$y = bx + a$$

Dónde:

b = Pendiente de la recta.
 a = El intercepto con la ordenada.
 sb = Desviación estándar de la pendiente.
 r^2 = Coeficiente de correlación al cuadrado.
 F = Indicador de dispersión en las varianzas de un método.
 $ssrg$ = Suma de cuadrados de la regresión.
 sa = Desviación del intercepto.
 sy/x = Error típico.
 dF = Grados de libertad para los residuales.
 $ssres$ = Suma de residuales al cuadrado.

De este análisis se obtienen las siguientes tres ecuaciones que sirven para el análisis cuantitativo de cualquier licor que se trate bajo las mismas condiciones de inyección.

Ecuación 2. Ecuación que modela el comportamiento de los datos de etanol para el día 1.

$$y = 1,00219E - 07x + 0,031485404$$

Ecuación 3. Ecuación que modela el comportamiento de los datos de etanol para el día 2.

$$y = 9,9737E - 08 + 0,032525561$$

Ecuación 4. Ecuación que modela el comportamiento de los datos de etanol para el día 3.

$$y = 9,94101E - 08 + 0,035069932$$

De manera general se puede decir que el coeficiente de correlación r^2 es correspondiente a una muy baja dispersión de los datos, existe una alta linealidad de estos, las desviaciones recaen en un sistema muy preciso debido a su valor tan bajo, al igual que el bajo error típico.

6.1.2.2 Análisis de varianza de un factor (ANOVA):

Tabla 12. Resumen del análisis de varianza de un factor para etanol 5%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,2636	0,0527	0,0002
Día 2	5	0,2845	0,0569	0,0001
Día 3	5	0,2317	0,0463	0,0001

Tabla 13. Análisis de varianza de un solo factor para el etanol 5%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,0003	2,0000	0,0001	1,2295	0,3268	3,8853
Dentro de los grupos	0,0014	12,0000	0,0001			
Total	0,0017	14,0000				

En la tabla 12. Presenta un resumen en donde se agrupan las varianzas de los tres días de análisis y se puede ver cómo estas son muy pequeñas, en la tabla 13. Se encuentra todo el análisis de varianza de un solo factor donde F es menor que el valor crítico de F, aceptando la hipótesis nula y se establece que no existe una diferencia estadísticamente diferente entre los valores obtenidos.

Todos tienen el mismo comportamiento descrito para el primer punto de etanol al 5%, varianzas despreciables y sin diferencias estadísticamente significativas de acuerdo al parámetro F, excepto el etanol al 35% para este caso se rechaza la hipótesis nula, no tiene desviación en la regresión lineal.(ver anexo A.1)

Mediante el método de curvas de calibración se realizaron curvas para: metanol, n-propanol, isobutanol, isopropanol, n-butanol, 2-butanol y 2-metil-1-butanol para los cuales se procedió de manera semejante a la descrita para el etanol (ver anexo A.1 a A.8).

6.1.3 Análisis de muestras:

Tabla 14. Análisis de diferentes licores mediante metodología de curvas de calibración día 1.

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción etanol	% Etanol	% Recuperación
C. Ron Marqués del Valle 8 años	1449257	0,5000	0,1767	35,3402	100,9720
C. Ron Santa FE	1719640	0,6000	0,2038	33,9656	97,0444
C.Ginebra	1775528	0,6500	0,2094	32,2144	80,5359
C. Vodka Absolut	1637743	0,6250	0,1956	31,2940	78,2349
C. Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	425475	0,7000	0,0741	10,5883	36,5113
C.ChivasRegal	1649079	0,6500	0,1967	30,2651	75,6627
C.Muestra Verde	1475694	0,8000	0,1793	22,4187	0,0000
C. Muestra Morada	2233319	0,6500	0,2553	39,2714	0,0000

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción etanol	% Etanol	% Recuperación
C. Aperitivo de Brandy Caravel	699809	0,6500	0,1016	15,6317	104,2116
C. Vino Doña Flor	567715	0,7750	0,0884	11,4026	91,2211
C. Aguardiente Antioqueño	1359660	0,5000	0,1677	33,5447	115,6713
C. Aperitivo de Aguardiente	648724	0,5000	0,0965	19,2975	128,6501
C. Cárcel 1	533778	1,0000	0,0850	8,4970	
C. Cárcel 2	134971	1,0000	0,0450	4,5009	
C. Cárcel 3	101304	1,0000	0,0416	4,1636	

Este análisis se da mediante la aplicación de las ecuaciones halladas para cada día, de manera general se tiene un buen porcentaje de recuperación, salvo algunos casos, en las muestras donde no es posible analizar dicho parámetro se debe a que estas son muestras clandestinas donde se esperó encontrar contenido no alcoholes no deseado, por lo tanto no se tiene un valor referenciado de estas. El análisis anterior se aplica con los datos obtenidos para los días 2 y 3 (ver anexo A).

Tabla 15. Resumen de los principales parámetros estadísticos de los alcoholes analizados.

Parámetro	Etanol	Metanol	Propanol	Isopropanol	Isobutanol	n-butanol	2-metil-1-butanol	2-butanol
Desviación estándar	0,0081	0,0111	0,0044	0,0051	0,0052	0,0021	0,0053	0,0046
Precisión	0,0291	0,1228	0,1262	0,1616	0,2072	0,0711	0,1482	0,1348
Exactitud	91,1300%	95,6099%	99,0034%	99,0290%	99,0684%	98,9870%	99,0141%	98,4596%
Límite de cuantificación	0,1578	0,2390	0,1454	0,2022	0,1284	0,0325	0,2272	0,1263
Límite de Detección	0,0473	0,0717	0,0436	0,0607	0,0385	0,0097	0,0682	0,0379
r2	0,9952333	0,99643333	0,9935	0,9936	0,9927	0,995433333	0,9924	0,979466667

En la tabla 15 se resumen los principales parámetros estadísticos que se evaluaron para los 8 alcoholes que fueron objeto de estudio, los análisis completos se encuentran en el anexo A.1.3.1 a A.8.3.1.

6.2 Análisis mediante la aplicación de la NTC 4118 por cromatografía de gases

En el cromatograma de la muestra de control (C) (ver figura 112) se puede observar como la señal del solvente es la más pronunciada y los demás componentes los identifica pero son señales muy pequeñas (ver figura 12) , el método está planteado con lo sugerido en la NTC 4118, pero existe un tiempo muerto muy grande, al igual que en la metodología de curvas de calibración se puede acortar y como al final se ven unos compuestos, se puede acortar el método a 5 minutos y empezar un gradiente de temperatura para eliminar dichos compuestos rápidamente ya que el tiempo de retención se ve afectado por el aumento de la temperatura.

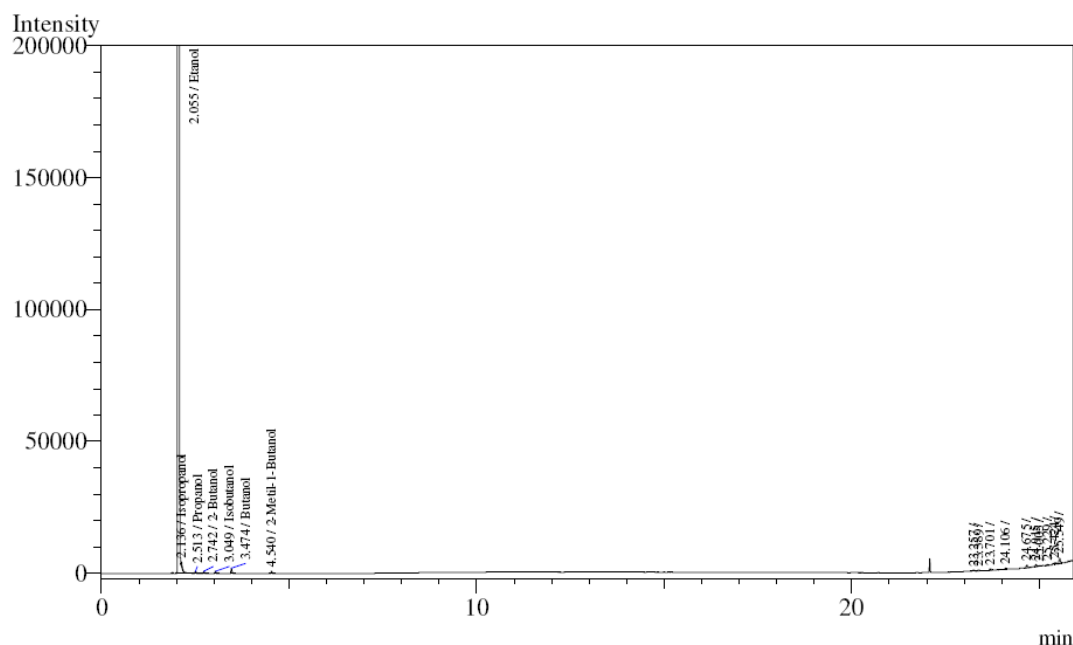


Figura 12. Cromatograma de muestra de control (C)

6.2.1 Datos de la preparación de las soluciones de trabajo

Los datos contenidos en las tablas 15 a 20 corresponden a la información recolectada para el día 1 de análisis con 5 repeticiones por día, con los datos obtenidos en la serie de soluciones de trabajo se calculan las diferentes composiciones mediante ecuaciones planteadas por la NTC 4118, todo el procedimiento descrito en la norma se siguió minuciosamente pero debido a cambio de tecnología algunos de los parámetros descritos en ella no modelan de manera adecuada un sistema que pueda entregar una información clara y coherente.

Tabla 16. Pesos de cada compuesto para la solución stock (A) de partida para el día 1.

Fecha de preparación 30/07/2014						
Solución estándar stock (A)						
Compuesto	Volumen (ml)	Peso (g)				
		Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Peso balón vacío	NA	8,5843	8,6206	8,6367	8,6168	8,6095
Peso balón vacío + tapa	NA	10,5628	10,5633	10,5788	10,5594	10,5519
Acetaldehído	0,05	0,0238	0,0291	0,0273	0,0329	0,0290
Metanol	0,05	0,0354	0,0354	0,0337	0,0314	0,0340
n-Propanol	0,05	0,0475	0,0478	0,0462	0,0546	0,0451
Isopropanol	0,05	0,0416	0,0466	0,0455	0,0434	0,0432

Fecha de preparación 30/07/2014						
Solución estándar stock (A)						
Compuesto	Volumen (ml)	Peso (g)				
		Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Isobutanol	0,05	0,0583	0,0500	0,0417	0,0418	0,0432
2-butanol	0,05	0,0528	0,0442	0,0490	0,0435	0,0430
2-metil-1-butanol	0,05	0,0512	0,0506	0,0432	0,0461	0,0486
Etanol	Aforo	3,5694	3,5763	3,5971	3,5909	3,6302
Peso total de la solución		3,88	3,8800	3,8800	3,8837	3,8846

Tabla 17. Preparación de estándar de partida interno IS, (B) para el día 1.

Fecha de preparación 30/07/2014						
Solución estándar de partida del estándar interno IS (B)						
Compuesto	Volumen (ml)	Peso (g)				
		Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Peso balón vacío	NA	6,8862	6,8225	6,8910	6,8705	6,8804
Peso balón vacío + tapa	NA	8,9199	8,9156	8,9164	8,9169	8,9210
Peso IS	0,125	0,1160	0,1158	0,1087	0,1100	0,1130
Peso total de la solución		3,9121	3,9121	3,9404	3,9076	3,9291

Tabla 18. Solución estándar de trabajo de los factores de respuesta RF (C) el día 1.

Fecha de preparación 30/07/2014						
Solución estándar de trabajo de los Factores de Respuesta RF (C)						
Compuesto	Volumen (ml)	Peso (g)				
		Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Peso balón vacío	NA	6,6299	6,6824	6,6764	6,6613	6,6657
Peso balón vacío + tapa	NA	8,6064	8,6597	8,6555	8,6403	8,6437
Solución (A)	0,05	0,0341	0,0374	0,0346	0,0362	0,0348
Solución (B)	0,05	0,0360	0,0352	0,0352	0,0351	0,0339
Peso total de la solución		5,685	6,6299	6,6824	6,6764	6,6613

Tabla 19. Solución de estándar interno IS (D) día 1.

Fecha de preparación 30/07/2014						
Solución estándar interno IS (D)						
Compuesto	Volumen (ml)	Peso (g)				
		Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Peso balón vacío	NA	6,7607	6,8220	6,8130	6,8170	6,8037
Peso balón vacío + tapa	NA	8,7944	8,8570	8,8487	8,8538	8,8402

Fecha de preparación 30/07/2014						
Solución estándar interno IS (D)						
Compuesto	Volumen (ml)	Peso (g)				
		Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
solución (B)	0,5	0,1860	0,2220	0,2524	0,3807	0,3823
Peso total de la solución		4,7184	4,7184	4,6683	4,6867	4,6582

Tabla 20. Solución estándar de control de calidad (CC) día 1.

Fecha de preparación 30/07/2014					
Solución estándar de control de calidad (CC)					
Compuesto	Peso (g)				
	Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Peso balón vacío	6,7620	6,7580	6,9078	6,9540	6,7800
Peso balón vacío + tapa	8,8162	8,8345	8,8972	8,7945	8,7852
Solución estándar stock previa (A)	0,0372	0,0350	0,0777	0,0360	0,0362
Peso total de la solución	4,7088	4,7736	4,9124	4,7136	4,7398

Tabla 21. Solución de control de calidad (CC) que contiene la solución (D) día 1.

Fecha de preparación 30/07/2014						
Solución de control de calidad (CC) que contiene solución de trabajo del estándar interno IS (D)						
Compuesto	Volumen (ml)	Peso (g)				
		Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Solución (CC)	0,45	0,3869	0,4176	0,4198	0,4199	0,4219
Solución de trabajo IS (D)	0,05	0,0484	0,0479	0,0488	0,0493	0,0495
Total=		0,4353	0,4655	0,4686	0,4692	0,4714

Los datos finalmente se presentan en partes por millón donde realizando aproximaciones a porcentaje másico se estaría tratando de trazas.

Tabla 22. Resultados obtenidos para la estandarización en el día 1.

Resultados					
CÁLCULO DE LA CONCENTRACIÓN DE LOS COMPUESTOS EN LA SOLUCIÓN ESTÁNDAR DE RF (SOLUCIÓN C)					
	Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
F	154,5938	207,8932	192,096	199,5471	190,8984
Concentración (x) mg/Kg					

Resultados					
	Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Acetaldehído	3,6793	6,0497	5,2442	6,5651	5,5361
Metanol	5,4726	7,3594	6,4736	6,2658	6,4905
n-Propanol	7,3432	9,9373	8,8748	10,8953	8,6095
Isopropanol	6,4311	9,6878	8,7404	8,6603	8,2468
Isobutanol	9,0128	10,3947	8,0104	8,3411	8,2468
2-butanol	8,1626	9,1889	9,4127	8,6803	8,2086
2-metil-1-butanol	7,9152	10,5194	8,2985	9,1991	9,2777
Etanol	551,8073	743,4884	690,9887	716,5536	692,9993
CÁLCULO DE LA CONCENTRACIÓN DEL ESTÁNDAR INTERNO (IS) EN LA SOLUCION C					
Concentración IS	187,7673	223,1060	211,1301	210,4214	209,0846
CÁLCULO DE LA CONCENTRACIÓN DEL ESTÁNDAR INTERNO IS EN LA SOLUCIÓN DE TRABAJO (SOLUCION D)					
Concentración IS (tr)	1168,8700	1397,5340	1498,1030	2288,0440	2358,2610
CÁLCULO DE LOS FACTORES DE RESPUESTA					
Factor de respuesta RF					
	Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Acetaldehído	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Metanol	0,0805	0,0955	0,0854	0,0821	0,0837
n-Propanol	0,1086	0,1246	0,1100	0,1069	0,1144
Isopropanol	0,0581	0,0553	0,0617	0,0128	0,0548
Isobutanol	0,1018	0,1299	0,0880	0,1109	0,1125
2-butanol	0,1075	0,0990	0,1222	0,1123	0,1111
2-metil-1-butanol	0,0855	0,1043	0,0758	0,0886	0,0970
Etanol	0,0022	0,0026	0,0024	0,0025	0,0024
CÁLCULO DE LA CONCENTRACIÓN DE LOS COMPONENTES EN LA SOLUCIÓN DE CONTROL DE CALIDAD (SOLUCIÓN CC)					
Factor X					
	Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Factor X	0,0506	0,0570	0,0565	0,0581	0,0579
Concentración del componente					
Acetaldehído	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Metanol	6,0016	7,3222	6,9482	6,5595	5,5409
n-Propanol	6,5229	8,1706	7,2353	6,9959	7,5732
Isopropanol	14,0932	13,2121	20,1038	3,6955	7,4797
Isobutanol	7,9332	10,9496	7,6672	9,7125	9,9797
2-butanol	7,4228	7,3739	9,3878	8,6305	8,4266
2-metil-1-butanol	7,0357	9,5390	7,1500	8,0203	9,0257
Etanol	502,8927	622,8032	607,5361	624,1789	587,4062

6.2.2 Parámetros estadísticos generales:

Tabla 23. Información estadística de todos los componentes en los tres días de análisis.

Metanol			
Parámetro	día 1	día 2	día 3
Desviación estándar	0,7151	0,7269	1,7228
Promedio	6,4745	6,9274	7,0881
Precisión	0,1145	0,1049	0,2431
Límite de cuantificación	7,1511	7,2688	17,2280
Límite de Detección	2,1453	2,1807	5,1684
n-Propanol			
Parámetro	día 1	día 2	día 3
Desviación estándar	0,6191	0,2229	0,9033
Promedio	7,2996	7,1876	7,8937
Precisión	0,0848	0,0310	0,1144
Límite de cuantificación	6,1910	2,2290	9,0326
Límite de Detección	1,8573	0,6687	2,7098
Isopropanol			
Parámetro	día 1	día 2	día 3
Desviación estándar	6,3348	9,5547	2,9173
Promedio	11,7169	12,7927	5,7853
Precisión	0,5407	0,7469	0,5043
Límite de cuantificación	63,3482	95,5474	29,1728
Límite de Detección	19,0045	28,6642	8,7518
Isobutanol			
Parámetro	día 1	día 2	día 3
Desviación estándar	1,4030	0,2747	1,0184
Promedio	9,2484	6,8876	7,9623
Precisión	0,1517	0,0399	0,1279
Límite de cuantificación	14,0303	2,7467	10,1836
Límite de Detección	4,2091	0,8240	3,0551
2-butanol			
Parámetro	día 1	día 2	día 3
Desviación estándar	0,8548	0,2649	1,1427
Promedio	8,2483	6,9086	8,0160
Precisión	0,1036	0,0383	0,1426
Límite de cuantificación	8,5477	2,6492	11,4269
Límite de Detección	2,5643	0,7948	3,4281

2-metil-1-butanol			
Parámetro	día 1	día 2	día 3
Desviación estándar	1,1129	0,2975	1,1660
Promedio	8,1541	6,4387	8,2799
Precisión	0,1365	0,0462	0,1408
Límite de cuantificación	11,1294	2,9753	11,6601
Límite de Detección	3,3388	0,8926	3,4980
n-butanol (IS)			
Parámetro	día 1	día 2	día 3
Desviación estándar	12,7861	1,8944	2,6378
Promedio	208,3019	221,4530	197,0064
Precisión	0,0614	0,0086	0,0134
Límite de cuantificación	127,8606	18,9438	26,3777
Límite de Detección	38,3582	5,6831	7,9133
Etanol			
Parámetro	día 1	día 2	día 3
Desviación estándar	50,3508	23,1933	70,9289
Promedio	588,9634	621,4569	699,8217
Precisión	0,0855	0,0373	0,0101
Límite de cuantificación	503,5080	231,9325	709,2888
Límite de Detección	151,0524	69,5798	212,7866

La desviación estándar reporta valores < 3 de manera general salvo unos casos donde cabe resaltar que al tratarse de una unidad tan pequeña expresada en números enteros la aproximación de milésimas o millonésimas tiene una gran relevancia en el resultado, además para el caso del etanol a pesar de que la norma textualmente en su enunciado principal menciona que mediante ella se puede cuantificar etanol no se encuentra dentro de procedimiento la manera de determinarlo, de manera experimental se determinó el contenido de este mediante la diferencia de masas (teniendo en cuenta que este era el solvente).

Lastimosamente no se pudo cuantificar de manera satisfactoria ninguno de los analitos debido a ambigüedades en la NTC 4118 y a cálculos que se encuentran desactualizados y casi obsoletos para la tecnología del momento. En el anexo B se pueden observar toda la serie de ecuaciones que plantea la norma para el cálculo de las concentraciones.

A pesar de la falla del método se puede destacar que tuvo una precisión $< 0,2$ es decir, los valores no estaban muy dispersos entre ellos. Debido a no poseer un valor las concentraciones de referencia no es posible calcular la exactitud del método.

Teniendo en cuenta que las concentraciones están dadas en partes por millón, se puede decir que se trata de una metodología que puede cualificar y cuantificar trazas en una

matriz de interés.

6.2.3 Análisis de muestras:

Bajo las condiciones de la desactualización de la norma no es posible realizar una estandarización para cuantificación pero se podría tener en cuenta para cualificar ya que salvo dos casos con ausencia y presencia de metanol, se encuentra que los alcoholes identificados por el método de curvas de calibración son los mismos presentes en esta metodología, en esta solo aparece un alcohol nuevo que es el n-butanol que es el estándar interno.

Tabla 24. Análisis de diferentes licores mediante metodología NTC4118 día 1.

Promedio Día 1				
Ron Márquez del Valle 8 años				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,4033	0	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,4033	16781	0,0055	10,3831
isopropanol	0,4033	2454	0,0055	0,6497
isobutanol	0,4033	1116	0,0055	0,6652
2-butanol	0,4033	0	0,0012	0,0000
2-metil-1-butanol	0,4033	1677	0,0055	0,8299
Etanol	0,4033	1449257	0,0055	19,3303
Ron Santa Fe				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,2346	0	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,2346	0	0,0000	0,0000
isopropanol	0,2346	28120	0,0149	20,2889
isobutanol	0,2346	0	0,0000	0,0000
2-butanol	0,2346	0	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,2346	0	0,0000	0,0000
Etanol	0,2346	1662394	0,0149	60,4286
Ginebra				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,2722	0	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,2722	0	0,0000	0,0000
isopropanol	0,2722	10229	0,0124	6,1225
isobutanol	0,2722	0	0,0000	0,0000

2-butanol	0,2722	0	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,2722	0	0,0000	0,0000
Etanol	0,2722	2048080	0,0124	61,7597
Vodka Absolut				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,3814	0	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,3814	0	0,0000	0,0000
isopropanol	0,3814	7169	0,0092	3,1874
isobutanol	0,3814	0	0,0000	0,0000
2-butanol	0,3814	0	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,3814	0	0,0000	0,0000
Etanol	0,3814	1930821	0,0092	12105736,4599
Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,3613	0	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,3613	0	0,0000	0,0000
isopropanol	0,3613	52402	0,0107	27,1399
isobutanol	0,3613	0	0,0000	0,0000
2-butanol	0,3613	0	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,3613	0	0,0000	0,0000
Etanol	0,3613	425475	0,0107	11,1019
Chivas Regal				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,3544	0	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,3544	1808	0,0097	1,9874
isopropanol	0,3544	28863	0,0097	13,5753
isobutanol	0,3544	1618	0,0097	1,7134
2-butanol	0,3544	0	0,0018	0,0000
2-metil-1-butanol	0,3544	2516	0,0097	2,2121
Etanol	0,3544	1979742	0,0097	46,9116
Muestra Verde				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,2600	0	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,2600	0	0,0000	0,0000
isopropanol	0,2600	21980	0,0128	13,5872

isobutanol	0,2600	0	0,0000	0,0000
2-butanol	0,2600	0	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,2600	0	0,0000	0,0000
Etanol	0,2600	2051576	0,0128	63,8933
Muestra Morada				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,2153	0	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,2153	0	0,0000	0,0000
isopropanol	0,2153	70693	0,0124	42,4755
isobutanol	0,2153	0	0,0000	0,0000
2-butanol	0,2153	0	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,2153	0	0,0000	0,0000
Etanol	0,2153	2604048	0,0124	78,8272
Aperitivo de Brandy Caravel				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,2662	1114	0,0108	1,0311
n-Propanol	0,2662	0	0,0000	0,0000
isopropanol	0,2662	266679	0,0108	139,4843
isobutanol	0,2662	0	0,0000	0,0000
2-butanol	0,2662	0	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,2662	0	0,0000	0,0000
Etanol	0,2662	1249207	0,0108	32,9182
Vino Doña Flor				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,2836	1112	0,0113	1,0790
n-Propanol	0,2836	0	0,0000	0,0000
isopropanol	0,2836	28511	0,0113	18,3723
isobutanol	0,2836	0	0,0000	0,0000
2-butanol	0,2836	0	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,2836	2058	0,0113	2,1095
Etanol	0,2836	945529	0,0113	26,1205
Aguardiente Antioqueño				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,2657	0	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,2657	0	0,0000	0,0000

isopropanol	0,2657	11618	0,0133	7,5063
isobutanol	0,2657	0	0,0000	0,0000
2-butanol	0,2657	0	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,2657	0	0,0000	0,0000
Etanol	0,2657	1473564	0,0133	47,9656
Aperitivo de Aguardiente				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,2744	0	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,2744	0	0,0000	0,0000
isopropanol	0,2744	22462	0,0125	13,6041
isobutanol	0,2744	0	0,0000	0,0000
2-butanol	0,2744	0	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,2744	0	0,0000	0,0000
Etanol	0,2744	948002	0,0125	28,9264
Cárcel 1				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,3993	17718	0,0072	10,9449
n-Propanol	0,3993	0	0,0000	0,0000
isopropanol	0,3993	17318	0,0072	6,0452
isobutanol	0,3993	0	0,0000	0,0000
2-butanol	0,3993	0	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,3993	0	0,0000	0,0000
Etanol	0,3993	879825	0,0072	15,4731
Cárcel 2				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,3359	1253774	0,0094	1035,1497
n-Propanol	0,3359	0	0,0000	0,0000
isopropanol	0,3359	36983	0,0094	16,8492
isobutanol	0,3359	0	0,0000	0,0000
2-butanol	0,3359	0	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,3359	0	0,0000	0,0000
Etanol	0,3359	552261	0,0094	12,6761
Cárcel 3				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,3318	1037596	0,0091	808,3139
n-Propanol	0,3318	0	0,0000	0,0000

isopropanol	0,3318	24104	0,0091	10,6111
isobutanol	0,3318	0	0,0000	0,0000
2-butanol	0,3318	0	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,3318	0	0,0000	0,0000
Etanol	0,3318	498340	0,0091	11,0525

6.2.4 Análisis del estándar interno

Tabla 25. Área del estándar interno en las muestras y en los controles

Muestra	Área del pico
Ron Marqués del Valle 8 años	3373
Ron Santa FE	2681
Ginebra	2903
Vodka Absolut	2807
Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	2506
Chivas Regal	3025
Muestra Verde	2880
Muestra Morada	3547
Aperitivo de Brandy Caravel	3310
Vino Doña Flor	3022
Aguardiente Antioqueño	2761
Aperitivo de Aguardiente	2852
Cárcel 1	3263
Cárcel 2	3084
Cárcel 3	3169
C	3517
CC	3246

Tabla 26. Parámetros estadísticos generales para el IS

Parámetro	Día 1
Desviación estándar	283,3449
Promedio	3012,2000
Precisión	0,0941
Límite de cuantificación	2833,4487
Límite de Detección	850,0346

Teniendo en cuenta que las áreas que se están analizando es poco representativa la

desviación estándar que presentan los datos, como lo confirma la precisión de la metodología que relacionando todos los datos no tienen un coeficiente de varianza $> 0,1$ (ver tabla 25).

6.3 Análisis mediante espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier.

Para iniciar el análisis por espectroscopia infrarroja es necesario mencionar que esta es una técnica muy selectiva y precisa para el análisis de compuestos puros, por esta razón se decidió prestar mayor atención a los alcoholes que mayor relevancia por su concentración deseada en el caso del etanol, e indeseada en el caso del metanol.

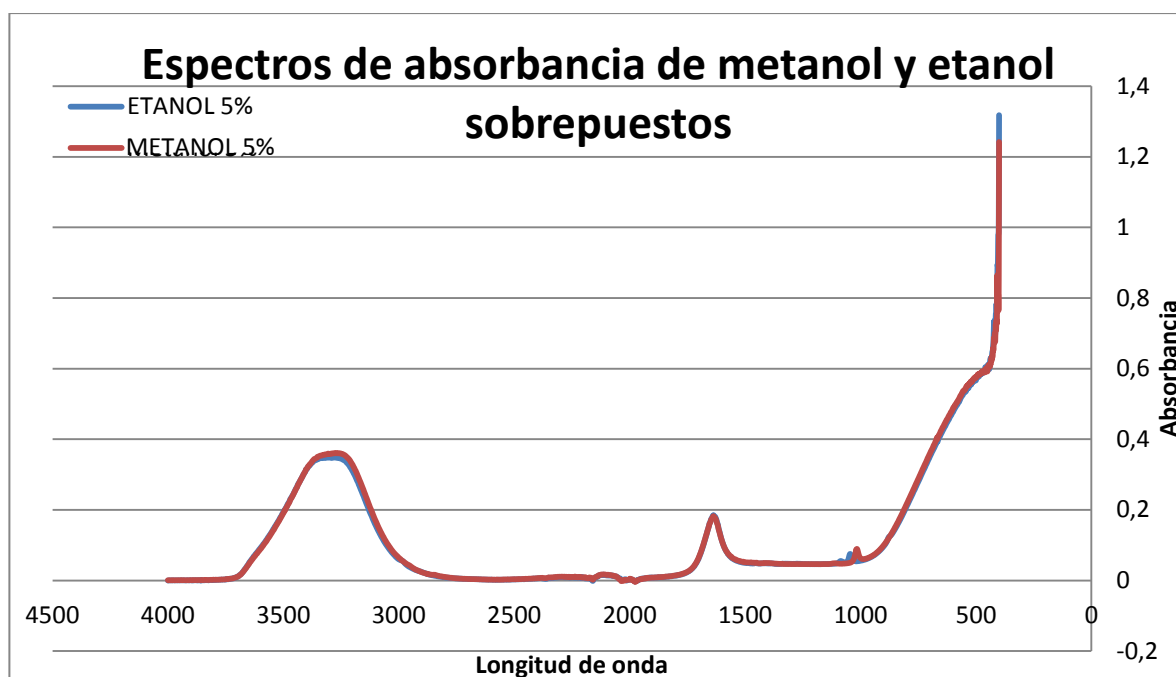


Figura 13. Espectro de absorción de metanol y etanol superpuestos

En la Figura 13, se encuentran solapados dos espectros medidos en absorbancia de dos muestras de la misma concentración (5%), donde son perfectamente parecidos excepto en la región de los 1000 cm^{-1} , allí el etanol por ser un alcohol primario presenta una señal a los 1040 cm^{-1} , mientras que el metanol que tiene 3 sustituyentes H, presenta una señal cerca a los 1010 cm^{-1} , siendo esta la única diferencia se analizaron dos bandas por cada analito de interés, para el metanol una 1013 cm^{-1} (siendo esta la banda diferencial) y la 3271 cm^{-1} correspondiente a la señal del grupo Hidroxilo (-OH), para el etanol también se tomó la banda selectiva a los 1043 cm^{-1} y la banda del Hidroxilo a 3274 cm^{-1} .

Se realizaron curvas de calibración como en el método de curvas de calibración donde el solvente fue agua, obteniendo los siguientes resultados:

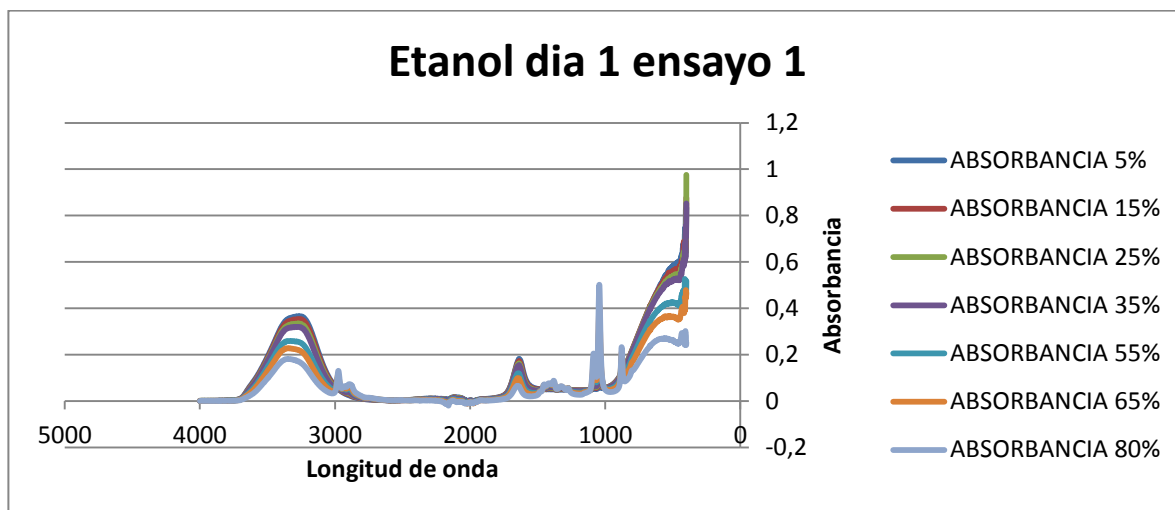


Figura 14. Análisis de etanol en el día 1 y la primera repetición.

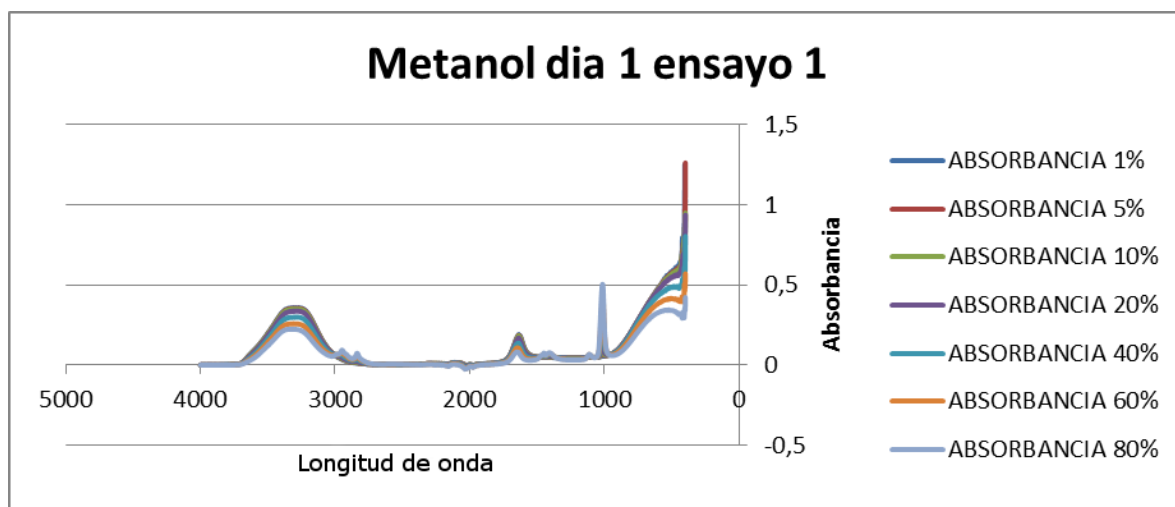


Figura 15. Análisis de metanol en el día 1 y la primera repetición.

(Las demás repeticiones se encuentran en el anexo C)

En la figura 14 y 15 se destaca un comportamiento en común, es necesario recordar que la tramitación y la absorbancia son inversamente proporcionales y que cuando aumenta la concentración la absorbancia aumenta, en este caso se cuenta con análisis de FT-IR en absorbancia se esperaría que a mayor concentración entonces las señales serían mayores, pero este principio solo modela las señales de 1013 cm^{-1} y 1043 cm^{-1} , la banda del -OH disminuye su área a medida que aumenta su concentración.

Tabla 27. Datos de la curva de calibración de etanol a 1043 cm^{-1} para el día 1

Día 1					
Concentración	Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
5%	0,0737	0,0782	0,0782	0,0735	0,0756
15%	0,1237	0,1261	0,1173	0,1262	0,1141
25%	0,1716	0,1631	0,1705	0,1715	0,1755
35%	0,2097	0,2215	0,2128	0,2295	0,2276
55%	0,3474	0,3197	0,3580	0,3453	0,3478
65%	0,4121	0,4138	0,3940	0,4126	0,4034
80%	0,5017	0,5183	0,4879	0,5012	0,4926

Para el análisis se tomaron los máximos de absorbancia de las dos señales de estudio.

6.3.1 Parámetros estadísticos generales:

Tabla 28. Parámetros estadísticos generales de etanol a 1043 cm^{-1}

Etanol 5%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0023	0,0014	0,0029
Promedio	7,5847%	7,2765%	7,8145%
Precisión	0,0305	0,0189	0,0367
Exactitud	98,4831%	98,5447%	98,4371%
Límite de cuantificación	0,0232	0,0138	0,0287
Límite de Detección	0,0069	0,0041	0,0086

Con esta técnica y siguiendo la metodología de curvas de calibración se obtienen excelentes resultados en la cuantificación y cualificación del etanol en la región de los 1043 cm^{-1} , con una precisión de $< 0,3$ se tiene un sistema con muy baja dispersión. La exactitud fue $> 98,4\%$, el límite de cuantificación $< 0,14$ y el límite de detección $< 0,04$ es decir que el límite confiable de cuantificación es $> 15\%$ y $< 25\%$ y puede detectar concentraciones $< 5\%$.

6.3.2 Análisis multivariado

6.3.2.1 Estimación lineal:

Tabla 29. Estimación lineal para de etanol a 1043 cm^{-1} en los 3 días de análisis.

Día 1				Día 2				Día 3			
Estimación lineal											
b	1,720579	-0,052242	a	b	1,65421591	-0,0279669	a	b	1,6056769	-0,043125	a
sb	0,059006	0,0177916	sa	sb	0,07301566	0,02196021	sa	sb	0,0562107	0,0178834	sa
r^2	0,994154	0,0230651	sy/x	r^2	0,99035266	0,02962951	sy/x	r^2	0,9939097	0,0235418	sy/x
F	850,2624	5	dF	F	513,277722	5	dF	F	815,97884	5	dF
ssrg	0,45234	0,00266	ssres	ssrg	0,45061046	0,00438954	ssres	ssrg	0,4522289	0,0027711	ssres

Siguiendo los mismos parámetros anteriormente expuestos, con los datos que presenta la estimación lineal(ver tabla 28) , permite obtener tres ecuaciones de los días de análisis.

Ecuación 5.Ecuación que modela el comportamiento de los datos de etanol para el día1.

$$y = 1,720579362x - 0,05224218$$

Ecuación 6. Ecuación que modela el comportamiento de los datos de etanol para el día 2.

$$y = 1,654215912 - 0,027966865$$

Ecuación 7. Ecuación que modela el comportamiento de los datos de etanol para el día 3.

$$y = 1,605676933 - 0,043125224$$

De manera general se puede decir que el coeficiente de correlación r^2 es correspondiente a una muy baja dispersión de los datos, a pesar de no ser tomados exactamente en la misma longitud de onda, es decir, los valores se tomaron cerca a la longitud de onda mencionada buscando el máximo de absorbancia. Los datos presentan una alta linealidad, no tiene una dispersión de datos relevante y el error típico es despreciable.

6.3.2.2 Análisis de varianza de un factor (ANOVA):

Tabla 30.Resumen del análisis de varianza de un factor para etanol 5% a 1043 cm^{-1}

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,3792	0,0758	5,35947E-06
Día 2	5	0,3638	0,0728	1,89208E-06
Día 3	5	0,3907	0,0781	8,22167E-06

Tabla 31. Análisis de varianza de un solo factor para el etanol 5% a 1043 cm⁻¹

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	7,2866E-05	2	3,6433E-05	7,0637	0,0094	3,8853
Dentro de los grupos	6,1893E-05	12	5,1577E-06			
Total	0,00013476	14				

Para los casos de 15 y 55% no se rechaza la hipótesis nula y se dice entonces que no existe una diferencia estadísticamente significativa entre los valores. Para los demás niveles de la curva se rechaza la hipótesis nula y no existe desviación en la regresión. En general la varianza es muy baja, es decir, los datos no están dispersos.

6.3.3 Análisis de muestras:

Tabla 32. Análisis de etanol (1043 cm⁻¹) en diferentes licores mediante la metodología de curvas de calibración FT-IR día 1.

Muestra	Absorbancia	factor de dilución	Fracción de etanol	% Etanol	% Recuperación
Ron Márquez del Valle 8 años	0,1407	0,5000	0,1899	37,9803	108,5150
Ron Santa FE	0,1244	0,6000	0,1618	26,9627	77,0363
Ginebra	0,1603	0,6500	0,2235	34,3886	85,9715
Vodka Absolut	0,1515	0,6250	0,2084	33,3389	83,3473
Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	0,0574	0,7000	0,0464	6,6352	22,8802
Chivas Regal	0,1493	0,6500	0,2046	31,4820	78,7050
Muestra Verde	0,1563	0,8000	0,2167	27,0883	
Muestra Morada	0,1639	0,6500	0,2298	35,3598	
Aperitivo de Brandy Caravel	0,0933	0,6500	0,1083	16,6582	111,0549
Aperitivo de Aguardiente	0,0890	0,5000	0,1009	20,1794	134,5291
Cárcel 1	0,0806	1,0000	0,0865	8,6466	
Cárcel 2	0,0609	1,0000	0,0525	5,2468	
Cárcel 3	0,0595	1,0000	0,0500	5,0049	

Con las ecuaciones 5, 6 y 7 se obtienen los diferentes concentraciones para los licores destilados, esta metodología tiene un excelente porcentaje de recuperación, es necesario aclarar que se obtuvieron datos para el etanol a dos longitudes de onda, obteniendo resultados favorables en 1013cm^{-1} , debido a que la banda del $-\text{OH}$ tenía sus máximos de absorbancia alejados de la longitud de onda establecida como punto máximo, por lo tanto no se obtuvieron resultados consistentes y reproducibles para la región de los 3274cm^{-1} , de igual manera se analizó el metanol (ver anexo C), pero se encontraron valores incoherentes en ambas longitudes de onda, por lo tanto es necesario aclarar que la técnica de espectroscopia infrarroja no es recomendable para mezclas complejas, debido a que pueden formarse enlaces por fuerzas de atracción y enmascarar la verdadera identidad del compuesto, para el caso se puede analizar el etanol ya que este es el componente primario en la solución.

Tabla 33. Resumen de los parámetros estadísticos de etanol y metanol en las distintas longitudes de onda

Parámetro	Etanol 1043 cm^{-1}	Etanol 3274 cm^{-1}	Metanol 3271 cm^{-1}	Metanol 1013 cm^{-1}
Desviación estándar	0,0073	0,0440	0,0098	0,0043
Precisión	0,0282	2,7628	0,0342	0,0166
Exactitud	99,3210%	13638,6100%	99,3174%	98,1097%
Límite de cuantificación	0,1428	1,5898	0,3802	0,1449
Límite de Detección	0,0428	0,4769	0,1141	0,0435
r ²	0,9928	0,9754	0,9690	0,9357

En la tabla 33 se encuentra un resumen de los principales parámetros estadísticos que se analizaron para el etanol y el metanol en las diferentes longitudes de onda, los resultados se encuentran en el Anexo C de manera detallada.

7. Conclusiones

- Se estandarizo un método por cromatografía de gases por el cual se puede identificar y cuantificar el etanol, metanol y alcoholes superiores presentes en las bebidas espirituosas de interés (Brandy, ginebra, ron, vodka, whisky). Adicionalmente se estandarizo la técnica conforme a los parámetros de la NTC 4118 por cromatografía de gases y se estandarizaron dos curvas de calibración por espectroscopia infrarroja.
- Se estandarizaron todas las condiciones adecuadas para su análisis, volumen de inyección, temperatura del puerto de inyección, temperatura de horno y detector, con una columna referencia RXT 1701 y el detector FID, obteniendo una buena resolución y resultados reproducibles.

- El estándar interno es un buen factor de respuesta para afirmar que las muestras fueron reproducibles ya que este no tuvo una variación significativa
- Se realizó todo el protocolo correspondiente a la estandarización de la metodología de determinación de etanol, metanol y alcoholes superiores para la aplicación de la NTC 4118 por cromatografía de gases, pero debido a que las ecuaciones planteadas por esta están basadas en equipos contemporáneos con la elaboración de la norma (1997), no fue posible llegar a los valores esperados.

8. Recomendaciones

- Es necesario la actualización de la NTC 4118, teniendo en cuenta los datos que brindan los softwares.

Bibliografía

- Aylott, R. (2013). Analytical Strategies Supporting. En *Comprehensive Analytical Chemistry, Vol. 60*. (págs. 409-435). Elsevier B.V.
- Aylott, R. (2013). *Food Protected Designation of Origin: Methodologies and Applications*. Elsevier B.V.
- Brill, S., & Wagner, M. (2012). Alcohol determination in beverages using polar capillary gas chromatography- mass spectroscopy and an acetonitrile internal standard. *Concordia collage journal of analytical chemistry*, 6-12.
- (s.f.). Chromatography fundamentals. En *Chromatography fundamentals, applications and troubleshooting* (págs. 35-50). Jhon Q. Walker.
- Cromatografía de gases*. (s.f.). Recuperado el 26 de enero de 2015, de http://www.mncn.csic.es/docs/repositorio/es_ES/investigacion/cromatografia/cromatografia_de_gases.pdf
- Diario Oficial No 36.388. (1983). *Decreto 3192 DE 1983*.
- Diario Oficial N° 41.220. (1994). *Decreto 365 de 1994*.
- Espectrometría*. (s.f.). Recuperado el 4 de Enero de 2015, de <http://www.espectrometria.com/>
- Espectrometría infrarroja*. (s.f.). Recuperado el 4 de enero de 2015, de http://www.espectrometria.com/espectrometria_infrarroja
- Gómez, R., & Murillo, R. (s.f.). *Espectroscopía infrarroja*. Recuperado el 9 de Enero de 2015, de <http://sistemas.fciencias.unam.mx/~fam/Infrarroja.pdf>
- González, J. (2003). Fundamentos de Caracterización de Materiales. Universidad Carlos III

- de Madrid.
- Harris, D. (1990). Análisis químico cuantitativo . Iberoamerica.
- Harris, P. (s.f.). *Regulación comparada de impurezas en bebidas alcoholicas*. Recuperado el 2 de Octubre de 2013, de <http://www.gobernabilidad.cl/modules.phpname=News&file=print&sid=2808>lunes
- ICONTEC. (1997). NTC 4118: Bebidas alcoholicas. Determinación de metanol y congéneres en bebidas alcohólicas y en alcohol etílico empleado en su elaboración, mediante cromatografía de gases. En I. C. Certificación.ICONTEC. Bogotá D.C.
- ICONTEC. (2007). NTC 5157: Bebidas alcohólicas y alcohol etílico,método para determinar el contenido de alcoholes superiores. En I. C. Certificación.ICONTEC. Bogotá D.C.
- Intoxicación por metanol-capitulo XII*. (s.f.). Recuperado el 10 de Enero de 2015, de <http://www.bio-nica.info/Biblioteca/Gutierrez-Intoxicacion-Metanol.pdf>
- Kirk, R., Sawyer, R., & Egan, H. (2005). En *Composición y análisis de alimentos de Pearson* (págs. 483-495). Continental.
- Mc Nair, H. (1981). Cromatografía de gases. Secretaría eneral de la OEA.
- Merk, K. (2011). Chrombook your guide to a fascinating world of chormatography .
- Ministerio de Salud y Protección social. (s.f.). Decreto numero 1686 de 2012. 1-40.
- Olguín, L., & Rodríguez, H. (2004). *Métodos en Biotecnología*. Universidad Nacional Autónoma de Mexico.
- Philp, J. (1986). Scotch whisky flavour development during maturation. London: Priest FG.
- Proyecto de ley 075 de 2011 Cámara*. (s.f.). Recuperado el 2 de septiembre de 2013, de http://servoaspr.imprenta.gov.co/gacetap/gaceta.mostrar_documento_top_tipo=05&pgn_umero=075&p_consec=30031
- Restek. (s.f.). Recuperado el 4 de noviembre de 2013, de Restek Capillary column installation guide- section III operational information: <http://www.restek.com/Restek-Capillary-Column-Installation-Guide-Section-III-Operational-Information>
- Robards, K., Haddad, P., & Jackson, P. (1994). Principles and prtice of mordern cromatography Methods. Academic Press Limited.
- Vollmer, G. (1999). Elementos de bromatología descriptiva. En G. Vollmer, G. Josst, D. Schenker, W. Sturm, & N. Vreden, *Elementos de bromatología descriptiva* (págs. 545-550). Acribia S.A.
- Wang, ML; Wang, JT; Choong, YM. (2004). A rapid and accurate method for determination of mathanol in alcoholic berverage by direct injection capillary gas chromatography. *FoodChemistry*, 187-196.
- Wang, ML; Wang, JT; Choong, YM. (2004). Simultaneus cuantification of methanol and etanol in alcoholic berverage using a rapid gas chromatograpy method coupling with dual internal standards. *FoodChemistry*, 609-615.
- Zapata, J. (2012). Una estimación de la adulteración y la falcificación de bebidas alcohólicas en Colombia. En J. Zapata, A. Sabogal, A. Montes, G. Rodríguez, & J. Castillo. Bogota D.C: La imprenta editores S.A.

Anexos

Anexo A. Análisis de curvas de calibración por cromatografía de gases.

A.1 Etanol

A.1.1 Parámetros estadísticos generales

Anexo 1. Parámetros estadísticos para el etanol en cada día de análisis.

Etanol 25%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0128	0,0158	0,0142
Promedio	24,0300%	23,7400%	24,1400%
Precisión	0,0532	0,0665	0,0588
Exactitud	87,9846%	88,1299%	87,9286%
Límite de cuantificación	0,1278	0,1578	0,1421
Límite de Detección	0,0383	0,0473	0,0426
Etanol 35%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0078	0,0150	0,0117
Promedio	35,7300%	38,9000%	40,7800%
Precisión	0,0219	0,0387	0,0287
Exactitud	91,0687%	90,2756%	89,8040%
Límite de cuantificación	0,0781	0,1505	0,1172
Límite de Detección	0,0234	0,0451	0,0352
Etanol 55%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0063	0,0032	0,0028
Promedio	55,2900%	57,3100%	51,6000%
Precisión	0,0114	0,0055	0,0055
Exactitud	88,9424%	88,5373%	89,6810%
Límite de cuantificación	0,0629	0,0317	0,0282
Límite de Detección	0,0189	0,0095	0,0085
Etanol 65%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0070	0,0062	0,0014
Promedio	64,8200%	64,8800%	64,8400%
Precisión	0,0107	0,0095	0,0022
Exactitud	93,5180%	93,5117%	93,5161%
Límite de cuantificación	0,0696	0,0617	0,0142

Etanol 25%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Límite de Detección	0,0209	0,0185	0,0043
Etanol 80%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0051	0,0068	0,0060
Promedio	80,0500%	80,0800%	79,7400%
Precisión	0,0001	0,0084	0,0076
Exactitud	94,6630%	94,6614%	94,6838%
Límite de cuantificación	0,0507	0,0675	0,0604
Límite de Detección	0,0152	0,0203	0,0181

A.1.2 Análisis multivariado

A.1.2.1 Análisis de varianza de un factor (ANOVA)

Anexo 2. Resumen del análisis de varianza de un factor para etanol 25%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	1,2015	0,2403	0,0002
Día 2	5	1,1870	0,2374	0,0002
Día 3	5	1,2071	0,2414	0,0002

Anexo 3. Análisis de varianza de un solo factor para el etanol 25%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	4,318E-05	2	2,159E-05	0,105428605	0,900763043	3,88529383
Dentro de los grupos	0,00245739	12	0,00020478			
Total	0,00250057	14				

Anexo 4. Resumen del análisis de varianza de un factor para etanol 35%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	1,7863	0,3573	0,0001
Día 2	5	1,7276	0,3455	0,0002
Día 3	5	1,8374	0,3675	0,0001

Anexo 5. Análisis de varianza de un solo factor para el etanol 35%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,00120752	2	0,00060376	4,265343749	0,03987186	3,88529383
Dentro de los grupos	0,0016986	12	0,00014155			
Total	0,00290612	14				

Anexo 6. Resumen del análisis de varianza de un factor para etanol 55%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	2,7644	0,5529	3,96E-05
Día 2	5	2,7698	0,5540	1,00E-05
Día 3	5	2,7713	0,5543	7,96E-06

Anexo 7. Análisis de varianza de un solo factor para el etanol 55%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	5,1924E-06	2	2,5962E-06	0,135304265	0,87476394	3,88529383
Dentro de los grupos	0,00023025	12	1,9188E-05			
Total	0,00023545	14				

Anexo 8. Resumen del análisis de varianza de un factor para etanol 65%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	3,2410	0,6482	4,84E-05
Día 2	5	3,2462	0,6492	2,94E-05
Día 3	5	3,2419	0,6484	2,01E-06

Anexo 9. Análisis de varianza de un solo factor para el etanol 65%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	3,0975E-06	2	1,5487E-06	0,058233422	0,94369464	3,88529383
Dentro de los grupos	0,00031914	12	2,6595E-05			
Total	0,00032224	14				

Anexo 10. Resumen del análisis de varianza de un factor para etanol 80%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	4,0027	0,8005	2,57E-05
Día 2	5	4,0040	0,8008	4,56E-05
Día 3	5	3,9872	0,7974	3,65E-05

Anexo 11. Análisis de varianza de un solo factor para el etanol 80%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	3,5189E-05	2	1,7594E-05	0,48942751	0,62469667	3,88529383
Dentro de los grupos	0,00043139	12	3,5949E-05			
Total	0,00046658	14				

A.1.3 Análisis de muestras destiladas**Anexo 12.** Análisis de etanol en diferentes licores mediante metodología de curvas de calibración día 2.

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción de etanol	% etanol	% Recuperación
C. Ron Márquez del Valle 8 años	1449257	0,5000	0,1771	35,4149	101,1854
C. Ron Santa FE	1719640,0000	0,6000	0,2040	34,0071	97,1631
C. Ginebra	1775528,0000	0,6500	0,2096	32,2487	80,6218
C. Vodka Absolut	1637743,0000	0,6250	0,1959	31,3399	78,3496

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción de etanol	% etanol	% Recuperación
C. Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	425475,0000	0,7000	0,0750	10,7089	36,9273
C.Chivas Regal	1649079,0000	0,6500	0,1970	30,3084	75,7711
C.Muestra Verde	1475694,0000	0,8000	0,1797	22,4639	0,0000
C. Muestra Morada	2233319,0000	0,6500	0,2553	39,2734	0,0000
C. Aperitivo de Brandy Caravel	699809,0000	0,6500	0,1023	15,7422	104,9483
C. Vino Doña Flor	567715,0000	0,7750	0,0891	11,5032	92,0253
C. Aguardiente Antioqueño	1359660,0000	0,5000	0,1681	33,6276	115,9573
C. Aperitivo de Aguardiente	648724,0000	0,5000	0,0972	19,4459	129,6391
C. Cárcel 1	533778,0000	1,0000	0,0858	8,5765	0,0000
C. Cárcel 2	134971,0000	1,0000	0,0460	4,5988	0,0000
Cárcel 3	101304,0000	1,0000	0,0426	4,2630	0,0000

Anexo 13. Análisis de etanol en diferentes licores mediante metodología de curvas de calibración día 3.

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción de etanol	% etanol	% Recuperación
C. Ron Márquez del Valle 8 años	1449257,0000	0,5000	0,1791	35,8281	102,3660
C. Ron Santa FE	1719640,0000	0,6000	0,2060	34,3366	98,1044
C. Ginebra	1775528,0000	0,6500	0,2116	32,5500	81,3751
C. Vodka Absolut	1637743,0000	0,6250	0,1979	31,6605	79,1512
C. Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	425475,0000	0,7000	0,0774	11,0523	38,1115
C. Chivas Regal	1649079,0000	0,6500	0,1990	30,6161	76,5403
C. Muestra Verde	1475694,0000	0,8000	0,1818	22,7211	0,0000
C. Muestra Morada	2233319,0000	0,6500	0,2571	39,5514	0,0000
C. Aperitivo de Brandy Caravel	699809,0000	0,6500	0,1046	16,0981	107,3209
C. Vino Doña Flor	567715,0000	0,7750	0,0915	11,8073	94,4583
C. Aguardiente Antioqueño	1359660,0000	0,5000	0,1702	34,0467	117,4026
C. Aperitivo de Aguardiente	648724,0000	0,5000	0,0996	19,9119	132,7461
C. Cárcel 1	533778,0000	1,0000	0,0881	8,8133	0,0000
C. Cárcel 2	134971,0000	1,0000	0,0485	4,8487	0,0000
C. Cárcel 3	101304,0000	1,0000	0,0451	4,5141	0,0000

A.2 Metanol

A.2.1 Parámetros estadísticos generales

Anexo 14. Parámetros estadísticos para el metanol % en cada día de análisis.

Metanol 1%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0039	0,0065	0,0044
Promedio	0,7800%	1,2900%	0,9200%
Precisión	0,5039	0,5064	0,4753
Exactitud	99,2190%	98,7113%	99,0800%
Límite de cuantificación	0,0394	0,0653	0,0437
Límite de Detección	0,0118	0,0196	0,0131
Metanol 5%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0051	0,0063	0,0075
Promedio	4,9100%	4,9400%	5,2400%
Precisión	0,1047	0,1266	0,1428
Exactitud	97,5461%	97,5286%	97,3783%
Límite de cuantificación	0,0514	0,0626	0,0749
Límite de Detección	0,0154	0,0188	0,0225
Metanol 10%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0113	0,0096	0,0100
Promedio	9,5900%	9,8000%	9,3500%
Precisión	0,1180	0,0978	0,1071
Exactitud	96,8030%	96,7327%	96,8827%
Límite de cuantificación	0,1132	0,0959	0,1002
Límite de Detección	0,0340	0,0288	0,0300
Metanol 20%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0109	0,0091	0,0065
Promedio	20,1800%	19,9600%	19,1100%
Precisión	0,0543	0,0455	0,0342
Exactitud	94,9558%	95,0100%	95,2218%
Límite de cuantificación	0,1095	0,0907	0,0653

Límite de Detección	0,0328	0,0272	0,0196
Metanol 40%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0239	0,0149	0,0106
Promedio	39,0800%	40,6600%	35,5800%
Precisión	0,0612	0,0367	0,0298
Exactitud	92,1844%	91,8688%	92,8844%
Límite de cuantificación	0,2390	0,1493	0,1060
Límite de Detección	0,0717	0,0448	0,0318
Metanol 60%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0178	0,0159	0,0139
Promedio	60,2200%	60,6500%	61,4900%
Precisión	0,0295	0,0262	0,0225
Exactitud	93,9780%	93,9348%	93,8511%
Límite de cuantificación	0,1776	0,1591	0,1386
Límite de Detección	0,0533	0,0477	0,0416
Metanol 80%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0147	0,0074	0,0226
Promedio	79,9200%	79,6100%	79,9200%
Precisión	0,0184	0,0094	0,0283
Exactitud	94,6718%	94,6926%	94,6723%
Límite de cuantificación	0,1468	0,0745	0,2264
Límite de Detección	0,0440	0,0223	0,0679

A.2.3 Análisis multivariado

A.2.3.1 Estimación lineal

Anexo 15. Estimación lineal para el metanol en los 3 días de análisis.

Dia 1				Dia 2				Dia 3			
Estimacion lineal											
b	2,23623E-07	0,0095895	a	b	2,23658E-07	0,0156609	a	b	2,2791E-07	0,0106972	a
sb	2,49495E-09	0,0043668	sa	sb	2,53498E-09	0,0044086	sa	sb	2,04416E-09	0,0035458	sa
r^2	0,9960325	0,0176079	sy/x	r^2	0,9959060	0,0178539	sy/x	r^2	0,9974323	0,0143709	sy/x
F	8033,5388205	32,0000000	dF	F	7784,3045802	32,0000000	dF	F	12430,7478262	32,0000000	dF
ssrg	2,4906934	0,0099212	ssres	ssrg	2,4813388	0,0102004	ssres	ssrg	2,5672169	0,0066087	ssres

A.2.3.2 Análisis de varianza de un factor (ANOVA)

Anexo 16. Resumen del análisis de varianza de un factor para metanol 1%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,0391	0,0078	1,55E-05
Día 2	5	0,0644	0,0129	4,26E-05
Día 3	5	0,0460	0,0092	1,91E-05

Anexo 17. Análisis de varianza de un solo factor para el metanol 1%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	6,88308E-05	2	3,44154E-05	1,337423467	0,298982656	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000308791	12	2,57326E-05			
Total	0,000377622	14				

Anexo 1. Resumen del análisis de varianza de un factor para metanol 5%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,2454	0,0491	2,64E-05
Día 2	5	0,2471	0,0494	3,91E-05
Día 3	5	0,2622	0,0524	5,61E-05

Anexo 19. Análisis de varianza de un solo factor para el metanol 5%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	3,40355E-05	2	1,70177E-05	0,419802525	0,666465215	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000486449	12	4,05375E-05			
Total	0,000520485	14				

Anexo 20. Resumen del análisis de varianza de un factor para metanol 10%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,4796	0,0959	0,0001
Día 2	5	0,4901	0,0980	9,20E-05
Día 3	5	0,4676	0,0935	0,0001

Anexo 21. Análisis de varianza de un solo factor para el metanol 10%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	5,07363E-05	2	2,53681E-05	0,237510594	0,792208914	3,885293835
Dentro de los grupos	0,001281701	12	0,000106808			
Total	0,001332438	14				

Anexo 22. Resumen del análisis de varianza de un factor para metanol 20%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	1,0089	0,2018	0,0001
Día 2	5	0,9980	0,1996	8,23E-05
Día 3	5	0,9557	0,1911	4,26E-05

Anexo 23. Análisis de varianza de un solo factor para el metanol 20%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,000316141	2	0,000158071	1,937315279	0,186580269	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000979111	12	8,15926E-05			
Total	0,001295252	14				

Anexo 24. Resumen del análisis de varianza de un factor para metanol 40%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	1,9539	0,3908	0,0006
Día 2	5	2,0328	0,4066	0,0002
Día 3	5	1,9969	0,3994	0,0001

Anexo 25. Análisis de varianza de un solo factor para el metanol 40%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,000624058	2	0,000312029	1,032619846	0,385660048	3,885293835
Dentro de los grupos	0,003626065	12	0,000302172			
Total	0,004250123	14				

Anexo 26. Resumen del análisis de varianza de un factor para metanol 60%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	3,0110	0,6022	0,0003
Día 2	5	3,0326	0,6065	0,0003
Día 3	5	3,0745	0,6149	0,0002

Anexo 27.Análisis de varianza de un solo factor para el metanol 60%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,000416227	2	0,000208113	0,820590672	0,463420863	3,885293835
Dentro de los grupos	0,00304337	12	0,000253614			
Total	0,003459596	14				

Anexo 282.Resumen del análisis de varianza de un factor para metanol 80%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	3,9961	0,7992	0,0002
Día 2	5	3,9805	0,7961	0,0001
Día 3	5	3,9958	0,7992	0,0005

Anexo 29.Análisis de varianza de un solo factor para el metanol 80%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	3,16952E-05	2	1,58476E-05	0,06069023	0,941401702	3,885293835
Dentro de los grupos	0,003133474	12	0,000261123			
Total	0,00316517	14				

A.2.4 Análisis de muestras

Anexo 30.Análisis de metanol en diferentes licores mediante metodología de curvas de calibración día 1.

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción de metanol	% metanol
C. Ron Márquez del Valle 8 años	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000
C. Ron Santa FE	0,0000	0,6000	0,0000	0,0000
C.Ginebra	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Vodka Absolut	0,0000	0,6250	0,0000	0,0000
C. Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	0,0000	0,7000	0,0000	0,0000
C.Chivas Regal	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C.Muestra Verde	0,0000	0,8000	0,0000	0,0000
C. Muestra Morada	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Aperitivo de Brandy Caravel	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Vino Doña Flor	2306,0000	0,7750	0,0101	1,3039
C. Aguardiente Antioqueño	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000
C. Aperitivo de Aguardiente	3872,0000	0,5000	0,0105	2,0911
C. Cárcel 1	17830,0000	1,0000	0,0136	1,3577
C. Cárcel 2	1347745,0000	1,0000	0,3110	31,0972
C.Cárcel 3	1217534,0000	1,0000	0,2819	28,1854

Anexo 31. Análisis de metanol en diferentes licores mediante metodología de curvas de calibración día 2.

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción de metanol	% metanol
C. Ron Márquez del Valle 8 años	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000
C. Ron Santa FE	0,0000	0,6000	0,0000	0,0000
C. Ginebra	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Vodka Absolut	0,0000	0,6250	0,0000	0,0000
C. Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	0,0000	0,7000	0,0000	0,0000
C. Chivas Regal	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Muestra Verde	0,0000	0,8000	0,0000	0,0000
C. Muestra Morada	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Aperitivo de Brandy Caravel	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Vino Doña Flor	2306,0000	0,7750	0,0162	2,0873
C. Aguardiente Antioqueño	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000
C. Aperitivo de Aguardiente	3872,0000	0,5000	0,0165	3,3054
C. Cárcel 1	17830,0000	1,0000	0,0196	1,9649
C. Cárcel 2	1347745,0000	1,0000	0,3171	31,7098
C. Cárcel 3	1217534,0000	1,0000	0,2880	28,7975

Anexo 32. Análisis de metanol en diferentes licores mediante metodología de curvas de calibración día 3.

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción de metanol	% metanol
C. Ron Márquez del Valle 8 años	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000
C. Ron Santa FE	0,0000	0,6000	0,0000	0,0000
C. Ginebra	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Vodka Absolut	0,0000	0,6250	0,0000	0,0000
C. Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	0,0000	0,7000	0,0000	0,0000
C. Chivas Regal	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Muestra Verde	0,0000	0,8000	0,0000	0,0000
C. Muestra Morada	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Aperitivo de Brandy Caravel	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Vino Doña Flor	2306,0000	0,7750	0,0112	1,4481
C. Aguardiente Antioqueño	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000
C. Aperitivo de Aguardiente	3872,0000	0,5000	0,0116	2,3159
C. Cárcel 1	17830,0000	1,0000	0,0148	1,4761
C. Cárcel 2	1347745,0000	1,0000	0,3179	31,7862
C. Cárcel 3	1217534,0000	1,0000	0,2882	28,8185

A.3 Propanol

A.3.1 Parámetros estadísticos generales

Anexo 33. Parámetros estadísticos para el propanol en cada día de análisis.

Propanol 1%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0040	0,0030	0,0025
Promedio	1,0700%	0,9400%	0,9200%
Precisión	0,3754	0,3149	0,2738
Exactitud	98,9300%	99,0584%	99,0758%
Límite de cuantificación	0,0402	0,0297	0,0253
Límite de Detección	0,0120	0,0089	0,0076
Propanol 2%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0028	0,0029	0,0018
Promedio	1,9800%	2,0100%	2,0500%
Precisión	0,1403	0,1434	0,0871
Exactitud	99,0092%	98,9928%	98,9735%
Límite de cuantificación	0,0278	0,0289	0,0179
Límite de Detección	0,0083	0,0087	0,0054
Propanol 3%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0018	0,0043	0,0016
Promedio	2,9800%	2,8400%	2,9900%
Precisión	0,0617	0,1526	0,0521
Exactitud	99,0069%	99,0536%	99,0041%
Límite de cuantificación	0,0184	0,0433	0,0156
Límite de Detección	0,0055	0,0130	0,0047
Propanol 4%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0020	0,0041	0,0105
Promedio	4,2600%	4,0700%	3,6800%
Precisión	0,0480	0,1016	0,2838
Exactitud	98,9354%	98,9816%	99,0792%
Límite de cuantificación	0,0205	0,0414	0,1045
Límite de Detección	0,0061	0,0124	0,0314
Propanol 5%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0017	0,0080	0,0044
Promedio	5,0400%	5,3000%	4,6000%
Precisión	0,0333	0,1508	0,0949
Exactitud	98,9921%	98,9394%	99,0796%
Límite de cuantificación	0,0168	0,0799	0,0437
Límite de Detección	0,0050	0,0240	0,0131

Propanol 10%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0145	0,0070	0,0054
Promedio	9,5800%	10,4400%	10,6000%
Precisión	0,1517	0,0671	0,0511
Exactitud	99,0418%	98,9556%	98,9401%
Límite de cuantificación	0,1454	0,0701	0,0541
Límite de Detección	0,0436	0,0210	0,0162
Propanol 15%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0078	0,0014	0,0008
Promedio	14,9100%	14,8600%	14,8900%
Precisión	0,0520	0,0097	0,0052
Exactitud	99,0061%	99,0091%	99,0076%
Límite de cuantificación	0,0776	0,0145	0,0077
Límite de Detección	0,0233	0,0043	0,0023

A.3.3 Análisis multivariado

A.3.3.1 Estimación lineal

Anexo 3. Estimación lineal para el propanol en los 3 días de análisis.

Dia 1				Dia 2				Dia 3			
Estimacion lineal											
b	6,84493E-08	0,0019028	a	b	6,93574E-08	0,0008282	a	b	6,90554E-08	0,0013065	a
sb	9,91207E-10	0,0009759	sa	sb	1,13406E-09	0,0011499	sa	sb	8,04672E-10	0,0008120	sa
r^2	0,9933344	0,0036219	sy/x	r^2	0,9915172	0,0042646	sy/x	r^2	0,9956738	0,0030797	sy/x
F	4768,8040850	32,0000000	dF	F	3740,3384550	32,0000000	dF	F	7364,7437112	32,0000000	dF
ssrg	0,0625588	0,0004198	ssres	ssrg	0,0680262	0,0005820	ssres	ssrg	0,0698535	0,0003035	ssres

A.3.3.2 Análisis de Varianza de un factor (ANOVA)

Anexo 4. Resumen del análisis de varianza de un factor para propanol 1%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,0535	0,0107	1,61E-05
Día 2	5	0,0471	0,0094	8,79E-06
Día 3	5	0,0462	0,0092	6,40E-06

Anexo 5. Análisis de varianza de un solo factor para el propanol 1%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	6,34116E-06	2	3,17058E-06	0,303606705	0,743657307	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000125317	12	1,04431E-05			
Total	0,000131658	14				

Anexo 6. Resumen del análisis de varianza de un factor para propanol 2%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,0991	0,0198	7,73E-06
Día 2	5	0,1007	0,0201	8,34E-06
Día 3	5	0,1027	0,0205	3,20E-06

Anexo 7. Análisis de varianza de un solo factor para el propanol 2%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	1,27729E-06	2	6,38647E-07	0,09941336	0,9061062	3,885293835
Dentro de los grupos	7,70898E-05	12	6,42415E-06			
Total	7,83671E-05	14				

Anexo 8. Resumen del análisis de varianza de un factor para propanol 3%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,1490	0,0298	3,38E-06
Día 2	5	0,1420	0,0284	1,88E-05
Día 3	5	0,1494	0,0299	2,43E-06

Anexo 9. Análisis de varianza de un solo factor para el propanol 3%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	6,94885E-06	2	3,47443E-06	0,423954084	0,663885118	3,885293835
Dentro de los grupos	9,83435E-05	12	8,19529E-06			
Total	0,000105292	14				

Anexo 10. Resumen del análisis de varianza de un factor para propanol 4%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,2129	0,0426	4,18E-06
Día 2	5	0,2037	0,0407	1,71E-05
Día 3	5	0,1842	0,0368	0,0001

Anexo 11. Análisis de varianza de un solo factor para el propanol 4%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	8,62364E-05	2	4,31182E-05	0,990808289	0,399708282	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000522218	12	4,35182E-05			
Total	0,000608455	14				

Anexo 12. Resumen del análisis de varianza de un factor para propanol 5%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,2520	0,0504	2,82E-06
Día 2	5	0,2652	0,0530	6,39E-05
Día 3	5	0,2375	0,0475	1,91E-05

Anexo 13. Análisis de varianza de un solo factor para el propanol 5%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	7,68452E-05	2	3,84226E-05	1,343199504	0,29757438	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000343263	12	2,86053E-05			
Total	0,000420108	14				

Anexo 14. Resumen del análisis de varianza de un factor para propanol 10%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,4791	0,0958	0,0002
Día 2	5	0,5222	0,1044	4,92E-05
Día 3	5	0,5299	0,1060	2,93E-05

Anexo 15. Análisis de varianza de un solo factor para el propanol 10%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,000299851	2	0,000149925	1,551704392	0,251557699	3,885293835
Dentro de los grupos	0,001159437	12	9,66198E-05			
Total	0,001459288	14				

Anexo 16. Resumen del análisis de varianza de un factor para propanol 15%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,7454	0,1491	6,02E-05
Día 2	5	0,7432	0,1486	2,09E-06
Día 3	5	0,7443	0,1489	5,92E-07

Anexo 17. Análisis de varianza de un solo factor para el propanol 15%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	5,0628E-07	2	2,5314E-07	0,012084512	0,98800022	3,885293835
Dentro de los grupos	0,00025137	12	2,09475E-05			
Total	0,000251876	14				

A.3.4 Análisis de muestras

Anexo 18. Análisis de propanol en diferentes licores mediante metodología de curvas de calibración día 1

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción propanol	% Propanol
C. Ron Márquez del Valle 8 años	1874,0000	0,5000	0,0020	0,4062
C. Ron Santa FE	1172,0000	0,6000	0,0020	0,3305
C. Ginebra	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Vodka Absolut	0,0000	0,6250	0,0000	0,0000
C. Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	0,0000	0,7000	0,0000	0,0000
C. Chivas Regal	1549,0000	0,6500	0,0020	0,3091
C. Muestra Verde	0,0000	0,8000	0,0000	0,0000
C. Muestra Morada	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Aperitivo de Brandy Caravel	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Vino Doña Flor	0,0000	0,7750	0,0000	0,0000
C. Aguardiente Antioqueño	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000
C. Aperitivo de Aguardiente	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 1	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 2	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 3	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000

Anexo 19. Análisis de propanol en diferentes licores mediante metodología de curvas de calibración día 2

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción de propanol	% Propanol
C. Ron Márquez del Valle 8 años	1874,0000	0,5000	0,0010	0,1916
C. Ron Santa FE	1172,0000	0,6000	0,0009	0,1516
C. Ginebra	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Vodka Absolut	0,0000	0,6250	0,0000	0,0000
C. Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	0,0000	0,7000	0,0000	0,0000
C. Chivas Regal	1549,0000	0,6500	0,0009	0,1439
C. Muestra Verde	0,0000	0,8000	0,0000	0,0000
C. Muestra Morada	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Aperitivo de Brandy Caravel	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción de propanol	% Propanol
C. Vino Doña Flor	0,0000	0,7750	0,0000	0,0000
C. Aguardiente Antioqueño	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000
C. Aperitivo de Aguardiente	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 1	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 2	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 3	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000

Anexo 20. Análisis de propanol en diferentes licores mediante metodología de curvas de calibración día 3

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción propanol	% Propanol
C. Ron Márquez del Valle 8 años	1874,0000	0,5000	0,0318	6,3575
C. Ron Santa FE	1172,0000	0,6000	0,0317	5,2862
C. Ginebra	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Vodka Absolut	0,0000	0,6250	0,0000	0,0000
C. Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	0,0000	0,7000	0,0000	0,0000
C. Chivas Regal	1549,0000	0,6500	0,0318	4,8854
C. Muestra Verde	0,0000	0,8000	0,0000	0,0000
C. Muestra Morada	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Aperitivo de Brandy Caravel	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Vino Doña Flor	0,0000	0,7750	0,0000	0,0000
C. Aguardiente Antioqueño	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000
C. Aperitivo de Aguardiente	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 1	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 2	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 3	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000

A.4 Isopropanol

A.4.2 Parámetros estadísticos generales

Anexo 21. Parámetros estadísticos para el isopropanol en cada día de análisis.

Isopropanol 1%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0050	0,0046	0,0023
Promedio	0,9800%	0,7700%	0,8700%
Precisión	0,5141	0,5955	0,2655
Exactitud	99,0226%	99,2308%	99,1323%
Límite de cuantificación	0,0502	0,0458	0,0230
Límite de Detección	0,0151	0,0137	0,0069
Isopropanol 2%			

Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0032	0,0064	0,0012
Promedio	1,9300%	1,6400%	2,0300%
Precisión	0,1642	0,3894	0,0569
Exactitud	99,0327%	99,1789%	98,9832%
Límite de cuantificación	0,0318	0,0639	0,0116
Límite de Detección	0,0095	0,0192	0,0035
Isopropanol 3%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0018	0,0033	0,0017
Promedio	3,2000%	3,1000%	3,0900%
Precisión	0,0549	0,1057	0,0556
Exactitud	98,9324%	98,9651%	98,9687%
Límite de cuantificación	0,0176	0,0328	0,0172
Límite de Detección	0,0053	0,0098	0,0052
Isopropanol 4%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0010	0,0044	0,0093
Promedio	4,0300%	3,8400%	3,5700%
Precisión	0,0237	0,1154	0,2616
Exactitud	98,9914%	99,0409%	99,1079%
Límite de cuantificación	0,0096	0,0443	0,0934
Límite de Detección	0,0029	0,0133	0,0280
Isopropanol 5%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0062	0,0050	0,0112
Promedio	5,5200%	5,2400%	4,7100%
Precisión	0,1124	0,0948	0,2372
Exactitud	98,8966%	98,9522%	99,0576%
Límite de cuantificación	0,0620	0,0497	0,1118
Límite de Detección	0,0186	0,0149	0,0335
Isopropanol 10%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0038	0,0066	0,0075
Promedio	10,0100%	9,7500%	9,9200%
Precisión	0,0383	0,0676	0,0753
Exactitud	98,9993%	99,0251%	99,0081%
Límite de cuantificación	0,0383	0,0659	0,0747
Límite de Detección	0,0115	0,0198	0,0224
Isopropanol 15%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0007	0,0202	0,0024
Promedio	14,9400%	13,9700%	14,8500%
Precisión	0,0048	0,1448	0,0158
Exactitud	99,0041%	99,0686%	99,0099%
Límite de cuantificación	0,0072	0,2022	0,0235

Límite de Detección	0,0022	0,0607	0,0071
---------------------	--------	--------	--------

A.4.3 Análisis multivariado

A.4.3.1 Estimación lineal

Anexo 22. Estimación lineal para el isopropanol en los 3 días de análisis.

Dia 1				Dia 2				Dia 3			
Estimacion lineal											
b	9,21606E-08	0,0001279	a	b	9,03252E-08	0,0024152	a	b	8,97468E-08	0,0003349	a
sb	1,3383E-09	0,0010257	sa	sb	1,29773E-09	0,0009875	sa	sb	1,21403E-09	0,0009366	sa
r^2	0,9932974	0,0037314	sy/x	r^2	0,9934380	0,0035267	sy/x	r^2	0,9941785	0,0034877	sy/x
F	4742,2354689	32,0000000	dF	F	4844,5380930	32,0000000	dF	F	5464,8511693	32,0000000	dF
ssrg	0,0660261	0,0004455	ssres	ssrg	0,0602535	0,0003980	ssres	ssrg	0,0664747	0,0003892	ssres

A.4.3.2 Análisis de varianza (ANOVA)

Anexo 23. Resumen del análisis de varianza de un factor para el isopropanol 1%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,0489	0,0098	2,52E-05
Día 2	5	0,0385	0,0077	2,10E-05
Día 3	5	0,0434	0,0087	5,31E-06

Anexo 24. Análisis de varianza de un factor para isopropanol 1%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	1,08469E-05	2	5,42345E-06	0,315707814	0,735148919	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000206144	12	1,71787E-05			
Total	0,000216991	14				

Anexo 25. Resumen del análisis de varianza de un factor para el isopropanol 2%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,0967	0,0193	1,00954E-05
Día 2	5	0,0821	0,0164	4,08881E-05
Día 3	5	0,1017	0,0203	1,33693E-06

Anexo 26. Análisis de varianza de un factor para isopropanol 2%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	4,14155E-05	2	2,07077E-05	1,187358755	0,338447697	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000209282	12	1,74402E-05			
Total	0,000250697	14				

Anexo 27. Resumen del análisis de varianza de un factor para el isopropanol 3%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,1601	0,0320	3,09E-06
Día 2	5	0,1552	0,0310	1,08E-05
Día 3	5	0,1547	0,0309	0,0000

Anexo 28. Análisis de varianza de un factor para isopropanol 3%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	3,59301E-06	2	1,79651E-06	0,32039778	0,731881941	3,885293835
Dentro de los grupos	6,72854E-05	12	5,60711E-06			
Total	7,08784E-05	14				

Anexo 29. Resumen del análisis de varianza de un factor para el isopropanol 4%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,2017	0,0403	9,16E-07
Día 2	5	0,1918	0,0384	1,96E-05
Día 3	5	0,1784	0,0357	8,72E-05

Anexo 30. Análisis de varianza de un factor para isopropanol 4%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	5,46973E-05	2	2,73487E-05	0,761960201	0,488058455	3,885293835
Dentro de los grupos	0,00043071	12	3,58925E-05			
Total	0,000485407	14				

Anexo 31. Resumen del análisis de varianza de un factor para el isopropanol 5%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,2758	0,0552	3,84E-05
Día 2	5	0,2620	0,0524	2,47E-05
Día 3	5	0,2573	0,0515	0,0001

Anexo 32. Análisis de varianza de un factor para isopropanol 5%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	3,72191E-05	2	1,86095E-05	0,296923835	0,748405311	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000752093	12	6,26745E-05			
Total	0,000789313	14				

Anexo 33. Resumen del análisis de varianza de un factor para el isopropanol 10%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,5003	0,1001	1,47E-05
Día 2	5	0,4874	0,0975	4,34E-05
Día 3	5	0,4959	0,0992	5,58E-05

Anexo 34. Análisis de varianza de un factor para isopropanol 10%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	1,72068E-05	2	8,60341E-06	0,226724384	0,800478452	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000455359	12	3,79465E-05			
Total	0,000472565	14				

Anexo 35. Resumen del análisis de varianza de un factor para el isopropanol 15%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,7469	0,1494	5,21E-07
Día 2	5	0,6986	0,1397	0,0004
Día 3	5	0,7426	0,1485	5,52E-06

Anexo 36. Análisis de varianza de un factor para isopropanol 15%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,000286581	2	0,000143291	1,03564335	0,384666712	3,885293835
Dentro de los grupos	0,00166031	12	0,000138359			
Total	0,001946891	14				

A.4.4 Análisis de muestras

Anexo 37. Análisis de isopropanol en diferentes licores mediante metodología de curvas de calibración día 1.

Muestra	Area	factor de dilución	Fracción isopropanol	% isopropanol
C. Ron Márquez del Valle 8 años	19576,0000	0,5000	0,0019	0,3864
C. Ron Santa FE	51716,0000	0,6000	0,0049	0,8157
C. Ginebra	13566,0000	0,6500	0,0014	0,2120
C. Vodka Absolut	12271,0000	0,6250	0,0013	0,2014
C. Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	29819,0000	0,7000	0,0029	0,4109
C. Chivas Regal	12333,0000	0,6500	0,0013	0,1946
C. Muestra Verde	230407,0000	0,8000	0,0214	2,6703
C. Muestra Morada	49171,0000	0,6500	0,0047	0,7169
C. Aperitivo de Brandy Caravel	21268,0000	0,6500	0,0021	0,3212
C. Vino Doña Flor	13103,0000	0,7750	0,0013	0,1723
C. Aguardiente Antioqueño	11038,0000	0,5000	0,0011	0,2291
C. Aperitivo de Aguardiente	228095,0000	0,5000	0,0211	4,2299
C. Cárcel 1	52472,0000	1,0000	0,0050	0,4964
C. Cárcel 2	79374,0000	1,0000	0,0074	0,7443
C. Cárcel 3	25966,0000	1,0000	0,0025	0,2521

Anexo 38. Análisis de isopropanol en diferentes licores mediante metodología de curvas de calibración día 2.

Muestra	Area	factor de dilución	Fracción isopropanol	% isopropanol
C. Ron Márquez del Valle 8 años	19576,0000	0,5000	0,0042	0,8376
C. Ron Santa FE	51716,0000	0,6000	0,0071	1,1819
C. Ginebra	13566,0000	0,6500	0,0036	0,5608
C. Vodka Absolut	12271,0000	0,6250	0,0035	0,5645
C. Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	29819,0000	0,7000	0,0051	0,7305
C. Chivas Regal	12333,0000	0,6500	0,0035	0,5437
C. Muestra Verde	230407,0000	0,8000	0,0232	2,9039
C. Muestra Morada	49171,0000	0,6500	0,0069	1,0556
C. Aperitivo de Brandy Caravel	21268,0000	0,6500	0,0043	0,6679
C. Vino Doña Flor	13103,0000	0,7750	0,0036	0,4650
C. Aguardiente Antioqueño	11038,0000	0,5000	0,0034	0,6834
C. Aperitivo de Aguardiente	228095,0000	0,5000	0,0230	4,6045
C. Cárcel 1	52472,0000	1,0000	0,0072	0,7160
C. Cárcel 2	79374,0000	1,0000	0,0096	0,9589
C. Cárcel 3	25966,0000	1,0000	0,0048	0,4765

Anexo 39. Análisis de isopropanol en diferentes licores mediante metodología de curvas de calibración día 3.

Muestra	Area	factor de dilución	Fracción isopropanol	% isopropanol
C. Ron Márquez del Valle 8 años	19576,0000	0,5000	0,0021	0,4184
C. Ron Santa FE	51716,0000	0,6000	0,0050	0,8294
C. Ginebra	13566,0000	0,6500	0,0016	0,2389
C. Vodka Absolut	12271,0000	0,6250	0,0014	0,2298
C. Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	29819,0000	0,7000	0,0030	0,4302
C. Chivas Regal	12333,0000	0,6500	0,0014	0,2218
C. Muestra Verde	230407,0000	0,8000	0,0210	2,6268
C. Muestra Morada	49171,0000	0,6500	0,0047	0,7305
C. Aperitivo de Brandy Caravel	21268,0000	0,6500	0,0022	0,3452
C. Vino Doña Flor	13103,0000	0,7750	0,0015	0,1950
C. Aguardiente Antioqueño	11038,0000	0,5000	0,0013	0,2651
C. Aperitivo de Aguardiente	228095,0000	0,5000	0,0208	4,1613
C. Cárcel 1	52472,0000	1,0000	0,0050	0,5044
C. Cárcel 2	79374,0000	1,0000	0,0075	0,7459
C. Cárcel 3	25966,0000	1,0000	0,0027	0,2665

A.5 Isobutanol

A.5.2 Parámetros estadísticos generales

Anexo 40. Parámetros estadísticos para el isobutanol en cada día de análisis.

isobutanol 1%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0063	0,0045	0,0044
Promedio	0,6900%	0,6200%	0,6700%
Precisión	91,8236	72,6391	65,9614
Exactitud	99,3104%	99,3766%	99,3316%
Límite de cuantificación	0,0633	0,0453	0,0441
Límite de Detección	0,0190	0,0136	0,0132
Isobutanol 2%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0029	0,0056	0,0014
Promedio	2,0200%	1,6600%	2,1100%
Precisión	14,6076	33,8458	6,8216
Exactitud	98,9907%	99,1702%	98,9440%
Límite de cuantificación	0,0295	0,0562	0,0144
Límite de Detección	0,0088	0,0169	0,0043

Isobutanol 3%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0028	0,0032	0,0027
Promedio	3,0400%	2,8400%	2,8000%
Precisión	9,2534	11,2283	9,5036
Exactitud	98,9861%	99,0536%	99,0659%
Límite de cuantificación	0,0281	0,0319	0,0266
Límite de Detección	0,0084	0,0096	0,0080
Isobutanol 4%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0043	0,0036	0,0095
Promedio	4,0000%	3,8300%	3,3400%
Precisión	10,6981	9,2717	28,5600
Exactitud	98,9991%	99,0425%	99,1662%
Límite de cuantificación	0,0428	0,0355	0,0953
Límite de Detección	0,0128	0,0107	0,0286
Isobutanol 5%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0041	0,0074	0,0057
Promedio	5,4100%	5,4500%	4,4100%
Precisión	7,5282	13,5105	12,8532
Exactitud	98,9189%	98,9107%	99,1176%
Límite de cuantificación	0,0407	0,0736	0,0567
Límite de Detección	0,0122	0,0221	0,0170
Isobutanol 10%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0128	0,0102	0,0054
Promedio	9,9000%	9,9300%	10,3300%
Precisión	12,9726	10,2579	5,2171
Exactitud	99,0103%	99,0067%	98,9670%
Límite de cuantificación	0,1284	0,1019	0,0539
Límite de Detección	0,0385	0,0306	0,0162
Isobutanol 15%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0055	0,0036	0,0035
Promedio	14,6000%	14,6200%	14,7600%
Precisión	3,7463	2,4781	2,4047
Exactitud	99,0268%	99,0256%	99,0162%
Límite de cuantificación	0,0547	0,0362	0,0355
Límite de Detección	0,0164	0,0109	0,0106

A.5.3 Análisis multivariado

A.5.3.1 Estimación lineal

Anexo 41. Estimación lineal para el isobutanol en los 3 días de análisis.

Dia 1				Dia 2				Dia 3			
Estimacion lineal											
b	6,89731E-08	-0,0033868	a	b	6,99622E-08	-0,0051101	a	b	6,87774E-08	-0,0035730	a
sb	1,15664E-09	0,0012072	sa	sb	9,7391E-10	0,0010158	sa	sb	9,91836E-10	0,0010363	sa
r^2	0,9910814	0,0042591	sy/x	r^2	0,9938372	0,0035988	sy/x	r^2	0,9933891	0,0037940	sy/x
F	3556,0075623	32,0000000	dF	F	5160,4602084	32,0000000	dF	F	4808,5198577	32,0000000	dF
ssrg	0,0645070	0,0005805	ssres	ssrg	0,0668338	0,0004144	ssres	ssrg	0,0692164	0,0004606	ssres

A.5.3.2 Análisis de varianza (ANOVA)

Anexo 42. Resumen del análisis de varianza de un factor para el isobutanol 1%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,0345	0,0069	4,01E-05
Día 2	5	0,0312	0,0062	2,05E-05
Día 3	5	0,0334	0,0067	1,94E-05

Anexo 43. Análisis de varianza de un factor para isobutanol 1%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	1,14281E-06	2	5,71407E-07	0,021417058	0,978847985	3,885293835
Dentro de los grupos	0,00032016	12	2,668E-05			
Total	0,000321303	14				

Anexo 44. Resumen del análisis de varianza de un factor para el isobutanol 2%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,1009	0,0202	8,69E-06
Día 2	5	0,0830	0,0166	3,16E-05
Día 3	5	0,1056	0,0211	2,08E-06

Anexo 45. Análisis de varianza de un factor para isobutanol 2%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	5,70451E-05	2	2,85225E-05	2,021836547	0,175091334	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000169287	12	1,41072E-05			
Total	0,000226332	14				

Anexo 46. Resumen del análisis de varianza de un factor para el isobutanol 3%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,1521	0,0304	7,92E-06
Día 2	5	0,1420	0,0284	1,02E-05
Día 3	5	0,1401	0,0280	7,09E-06

Anexo 47. Análisis de varianza de un factor para isobutanol 3%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	1,66373E-05	2	8,31866E-06	0,991201274	0,399573492	3,885293835
Dentro de los grupos	0,00010071	12	8,3925E-06			
Total	0,000117347	14				

Anexo 48. Resumen del análisis de varianza de un factor para el isobutanol 4%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,2002	0,0400	1,83E-05
Día 2	5	0,1915	0,0383	1,26E-05
Día 3	5	0,1668	0,0334	9,07E-05

Anexo 49. Análisis de varianza de un factor para isobutanol 4%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,00012021	2	6,01048E-05	1,481658843	0,266023557	3,885293835
Dentro de los grupos	0,00048679	12	4,05659E-05			
Total	0,000607	14				

Anexo 50. Resumen del análisis de varianza de un factor para el isobutanol 5%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,2703	0,0541	1,66E-05
Día 2	5	0,2723	0,0545	5,41E-05
Día 3	5	0,2305	0,0461	3,22E-05

Anexo 51. Análisis de varianza de un factor para isobutanol 5%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,000222376	2	0,000111188	3,242778388	0,074832846	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000411455	12	3,42879E-05			
Total	0,000633832	14				

Anexo 52. Resumen del análisis de varianza de un factor para el isobutanol 10%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,4948	0,0990	0,0002
Día 2	5	0,4966	0,0993	0,0001
Día 3	5	0,5165	0,1033	2,90E-05

Anexo 53. Análisis de varianza de un factor para isobutanol 10%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	5,78672E-05	2	2,89336E-05	0,291582913	0,752225335	3,885293835
Dentro de los grupos	0,001190752	12	9,92293E-05			
Total	0,001248619	14				

Anexo 54. Resumen del análisis de varianza de un factor para el isobutanol 15%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,7299	0,1460	2,99E-05
Día 2	5	0,7308	0,1462	1,31E-05
Día 3	5	0,7378	0,1476	1,26E-05

Anexo 55. Análisis de varianza de un factor para isobutanol 15%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	7,54469E-06	2	3,77235E-06	0,203471718	0,818650747	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000222479	12	1,85399E-05			
Total	0,000230024	14				

A.5.4 Análisis de muestras

Anexo 56. Análisis de isobutanol en diferentes licores mediante metodología de curvas de calibración día 1.

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción isobutanol	% isobutanol
C. Ron Márquez del Valle 8 años	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000
C. Ron Santa FE	0,0000	0,6000	0,0000	0,0000
C. Ginebra	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Vodka Absolut	0,0000	0,6250	0,0000	0,0000
C. Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	0,0000	0,7000	0,0000	0,0000
C. Chivas Regal	1662,0000	0,6500	0,0035	0,5392
C. Muestra Verde	0,0000	0,8000	0,0000	0,0000
C. Muestra Morada	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción isobutanol	% isobutanol
C. Aperitivo de Brandy Caravel	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Vino Doña Flor	0,0000	0,7750	0,0000	0,0000
C. Aguardiente Antioqueño	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000
C. Aperitivo de Aguardiente	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 1	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 2	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 3	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000

Anexo 57. Análisis de isobutanol en diferentes licores mediante metodología de curvas de calibración día 2.

Muestra	Area	factor de dilución	Fracción isobutanol	% isobutanol
C. Ron Márquez del Valle 8 años	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000
C. Ron Santa FE	0,0000	0,6000	0,0000	0,0000
C. Ginebra	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Vodka Absolut	0,0000	0,6250	0,0000	0,0000
C. Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	0,0000	0,7000	0,0000	0,0000
C. Chivas Regal	1662,0000	0,6500	0,0052	0,8040
C. Muestra Verde	0,0000	0,8000	0,0000	0,0000
C. Muestra Morada	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Aperitivo de Brandy Caravel	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Vino Doña Flor	0,0000	0,7750	0,0000	0,0000
C. Aguardiente Antioqueño	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000
C. Aperitivo de Aguardiente	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 1	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 2	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 3	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000

Anexo 58. Análisis de isobutanol en diferentes licores mediante metodología de curvas de calibración día 3.

Muestra	Area	factor de dilución	Fracción isobutanol	% isobutanol
C. Ron Márquez del Valle 8 años	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000
C. Ron Santa FE	0,0000	0,6000	0,0000	0,0000
C. Ginebra	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Vodka Absolut	0,0000	0,6250	0,0000	0,0000
C. Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	0,0000	0,7000	0,0000	0,0000
C. Chivas Regal	1662,0000	0,6500	0,0037	0,5668
C. Muestra Verde	0,0000	0,8000	0,0000	0,0000
C. Muestra Morada	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Aperitivo de Brandy Caravel	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Vino Doña Flor	0,0000	0,7750	0,0000	0,0000
C. Aguardiente Antioqueño	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000

Muestra	Area	factor de dilución	Fracción isobutanol	% isobutanol
C. Aperitivo de Aguardiente	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 1	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 2	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 3	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000

A.6 n-butanol

A.6.2 Parámetros estadísticos generales

Anexo 59. Parámetros estadísticos para el n-butanol en cada día de análisis.

Butanol 1%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0019	0,0020	0,0028
Promedio	1,0400%	0,9500%	1,0600%
Precisión	0,1842	0,2080	0,2601
Exactitud	98,9580%	99,0520%	98,9385%
Límite de cuantificación	0,0192	0,0197	0,0276
Límite de Detección	0,0058	0,0059	0,0083
Butanol 2%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0014	0,0019	0,0018
Promedio	1,9700%	2,0400%	2,1400%
Precisión	0,0694	0,0950	0,0860
Exactitud	99,0130%	98,9800%	98,9320%
Límite de cuantificación	0,0137	0,0194	0,0184
Límite de Detección	0,0041	0,0058	0,0055
Butanol 3%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0021	0,0025	0,0013
Promedio	3,1200%	2,9800%	3,1400%
Precisión	0,0680	0,0825	0,0429
Exactitud	98,9592%	99,0067%	98,9533%
Límite de cuantificación	0,0212	0,0246	0,0135
Límite de Detección	0,0064	0,0074	0,0040
Butanol 4%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0032	0,0029	0,0011
Promedio	4,0800%	4,0100%	4,1400%
Precisión	0,0795	0,0736	0,0257
Exactitud	98,9795%	98,9985%	98,9665%
Límite de cuantificación	0,0325	0,0295	0,0106
Límite de Detección	0,0097	0,0088	0,0032

Butanol 5%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0012	0,0013	0,0029
Promedio	4,9700%	5,0600%	5,0300%
Precisión	0,0241	0,0251	0,0581
Exactitud	99,0060%	98,9884%	98,9937%
Límite de cuantificación	0,0120	0,0127	0,0292
Límite de Detección	0,0036	0,0038	0,0088
Butanol 10%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0010	0,0021	0,0018
Promedio	10,0100%	9,8800%	10,1500%
Precisión	0,0104	0,0216	0,0177
Exactitud	98,9986%	99,0116%	98,9846%
Límite de cuantificación	0,0104	0,0213	0,0180
Límite de Detección	0,0031	0,0064	0,0054
Butanol 15%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0032	0,0029	0,0030
Promedio	14,9000%	14,8200%	15,1800%
Precisión	0,0217	0,0197	0,0195
Exactitud	99,0067%	99,0121%	98,9881%
Límite de cuantificación	0,0324	0,0292	0,0296
Límite de Detección	0,0097	0,0088	0,0089

A.6.3 Análisis multivariado

A.6.3.1 Estimación lineal

Anexo 60. Estimación lineal para el n-butanol en los 3 días de análisis.

Dia 1				Dia 2				Dia 3			
Estimacion lineal											
b	6,28352E-08	-0,0013325	a	b	6,27015E-08	-0,0016246	a	b	6,3832E-08	-0,0007295	a
sb	8,7511E-10	0,0010376	sa	sb	6,57605E-10	0,0007785	sa	sb	6,76972E-10	0,0008012	sa
r^2	0,9936399	0,0037878	sy/x	r^2	0,9963833	0,0028439	sy/x	r^2	0,9963020	0,0029295	sy/x
F	5155,6201728	33,0000000	dF	F	9091,2781708	33,0000000	dF	F	8890,6804616	33,0000000	dF
ssrg	0,0739708	0,0004735	ssres	ssrg	0,0735300	0,0002669	ssres	ssrg	0,0762986	0,0002832	ssres

A.6.3.2 Análisis de varianza (ANOVA)

Anexo 61. Resumen del análisis de varianza de un factor para el n-butanol 1%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,0521	0,0104	0,0000
Día 2	5	0,0474	0,0095	0,0000
Día 3	5	0,0531	0,0106	0,0000

Anexo 62. Análisis de varianza de un factor para n-butanol 1%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	3,70533E-06	2	1,85267E-06	0,36563384	0,701225304	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000060804	12	0,000005067			
Total	6,45093E-05	14				

Anexo 63. Resumen del análisis de varianza de un factor para el n-butanol 2%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,0987	0,0197	0,0000
Día 2	5	0,1020	0,0204	0,0000
Día 3	5	0,1068	0,0214	0,0000

Anexo 64. Análisis de varianza de un factor para n-butanol 2%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	6,636E-06	2	3,318E-06	1,104649872	0,362786754	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000036044	12	3,00367E-06			
Total	0,00004268	14				

Anexo 65. Resumen del análisis de varianza de un factor para el n-butanol 3%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,1561	0,0312	4,51E-06
Día 2	5	0,1490	0,0298	6,05E-06
Día 3	5	0,1570	0,0314	0,0000

Anexo 66. Análisis de varianza de un factor para n-butanol 3%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	7,69792E-06	2	3,84896E-06	0,933467422	0,419956808	3,885293835
Dentro de los grupos	4,94795E-05	12	4,12329E-06			
Total	5,71774E-05	14				

Anexo 67. Resumen del análisis de varianza de un factor para el n-butanol 4%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	2,0410E-01	4,0820E-02	1,0532E-05
Día 2	5	2,0030E-01	4,0060E-02	8,6830E-06
Día 3	5	2,0680E-01	4,1360E-02	1,133E-06

Anexo 68. Análisis de varianza de un factor para n-butanol 4%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	4,26533E-06	2	2,13267E-06	0,314428937	0,736042721	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000081392	12	6,78267E-06			
Total	8,56573E-05	14				

Anexo 69. Resumen del análisis de varianza de un factor para el n-butanol 5%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,2485	0,0497	0,0000
Día 2	5	0,2529	0,0506	0,0000
Día 3	5	0,2628	0,0526	0,0000

Anexo 70. Análisis de varianza de un factor para n-butanol 5%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	2,14573E-05	2	1,07287E-05	2,774655172	0,102217946	3,885293835
Dentro de los grupos	0,0000464	12	3,86667E-06			
Total	6,78573E-05	14				

Anexo 71. Resumen del análisis de varianza de un factor para el n-butanol 10%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,5007	0,1001	0,0000
Día 2	5	0,4942	0,0988	0,0000
Día 3	5	0,5077	0,1015	0,0000

Anexo 72. Análisis de varianza de un factor para n-butanol 10%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	1,82333E-05	2	9,11667E-06	3,080301836	0,083234963	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000035516	12	2,95967E-06			
Total	5,37493E-05	14				

Anexo 73. Resumen del análisis de varianza de un factor para el n-butanol 15%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,7450	0,1490	0,0000
Día 2	5	0,7409	0,1482	0,0000
Día 3	5	0,7589	0,1518	0,0000

Anexo 74. Análisis de varianza de un factor para n-butanol 15%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	3,56013E-05	2	1,78007E-05	1,921349932	0,188847965	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000111176	12	9,26467E-06			
Total	0,000146777	14				

A.7 2-metil-1-butanol

A.7.1 Parámetros estadísticos generales

Anexo 75. Parámetros estadísticos para el 2-metil-1-butanol en cada día de análisis.

2-metil-1-butanol 1%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0045	0,0047	0,0013
Promedio	0,9200%	0,8100%	0,9700%
Precisión	0,4921	0,5838	0,1296
Exactitud	99,0774%	99,1926%	99,0298%
Límite de cuantificación	0,0454	0,0471	0,0126
Límite de Detección	0,0136	0,0141	0,0038
2-metil-1-butanol 2%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0036	0,0027	0,0028
Promedio	1,8200%	2,0700%	2,1200%
Precisión	0,1960	0,1303	0,1310
Exactitud	99,0917%	98,9647%	98,9407%
Límite de cuantificación	0,0356	0,0270	0,0278
Límite de Detección	0,0107	0,0081	0,0083
2-metil-1-butanol 3%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0025	0,0026	0,0028
Promedio	3,1800%	3,0100%	2,9900%
Precisión	0,0782	0,0862	0,0951
Exactitud	98,9387%	98,9969%	99,0026%
Límite de cuantificación	0,0249	0,0259	0,0285
Límite de Detección	0,0075	0,0078	0,0085
2-metil-1-butanol 4%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0032	0,0023	0,0102
Promedio	4,1500%	3,9600%	3,5000%
Precisión	0,0776	0,0576	0,2900

Exactitud	98,9625%	99,0089%	99,1246%
Límite de cuantificación	0,0322	0,0228	0,1015
Límite de Detección	0,0097	0,0069	0,0305
2-metil-1-butanol 5%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0049	0,0122	0,0029
Promedio	5,5100%	5,6300%	4,7300%
Precisión	0,0887	0,2177	0,0604
Exactitud	98,8979%	98,8748%	99,0535%
Límite de cuantificación	0,0489	0,1225	0,0286
Límite de Detección	0,0147	0,0367	0,0086
2-metil-1-butanol 10%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0073	0,0067	0,0062
Promedio	9,7400%	9,7900%	9,8800%
Precisión	0,0750	0,0682	0,0629
Exactitud	99,0265%	99,0215%	99,0121%
Límite de cuantificación	0,0730	0,0668	0,0621
Límite de Detección	0,0219	0,0200	0,0186
2-metil-1-butanol 15%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0031	0,0227	0,0013
Promedio	15,0300%	13,9400%	14,8600%
Precisión	0,0203	0,1629	0,0086
Exactitud	98,9981%	99,0705%	99,0093%
Límite de cuantificación	0,0305	0,2272	0,0129
Límite de Detección	0,0092	0,0682	0,0039

A.7.3 Análisis multivariado

A.7.3.1 Estimación lineal

Anexo 76. Estimación lineal para el 2-metil-1-butanol en los 3 días de análisis.

Dia 1				Dia 2				Dia 3			
Estimacion lineal											
b	5,37549E-08	-0,0017781	a	b	5,45484E-08	-0,0030911	a	b	5,48843E-08	-0,0026691	a
sb	8,63075E-10	0,0012090	sa	sb	8,49441E-10	0,0011494	sa	sb	7,70968E-10	0,0010497	sa
r^2	0,9915648	0,0043935	sy/x	r^2	0,9920612	0,0040734	sy/x	r^2	0,9935305	0,0038431	sy/x
F	3879,1702638	33,0000000	dF	F	4123,8072739	33,0000000	dF	F	5067,8477987	33,0000000	dF
ssrg	0,0748801	0,0006370	ssres	ssrg	0,0684247	0,0005476	ssres	ssrg	0,0748479	0,0004874	ssres

A.7.3.2 Análisis de varianza (ANOVA)

Anexo 77. Resumen del análisis de varianza de un factor para el 2-metil-1-butanol 1%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,0461	0,0092	2,06136E-05
Día 2	5	0,0404	0,0081	2,22191E-05
Día 3	5	0,0485	0,0097	1,58147E-06

Anexo 78. Análisis de varianza de un factor para 2-metil-1-butanol 1%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	7,00677E-06	2	3,50339E-06	0,236639473	0,79287307	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000177657	12	1,48047E-05			
Total	0,000184664	14				

Anexo 79. Resumen del análisis de varianza de un factor para el 2-metil-1-butanol 2%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,0908	0,0182	1,26811E-05
Día 2	5	0,1035	0,0207	7,27593E-06
Día 3	5	0,1059	0,0212	7,70813E-06

Anexo 80. Análisis de varianza de un factor para 2-metil-1-butanol 2%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	2,63003E-05	2	1,31501E-05	1,425997998	0,278213715	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000110661	12	9,22171E-06			
Total	0,000136961	14				

Anexo 81. Resumen del análisis de varianza de un factor para el 2-metil-1-butanol 3%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,1592	0,0318	6,19215E-06
Día 2	5	0,1505	0,0301	6,72523E-06
Día 3	5	0,1496	0,0299	8,09807E-06

Anexo 82. Análisis de varianza de un factor para 2-metil-1-butanol 3%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	1,12614E-05	2	5,63069E-06	0,803792448	0,470328354	3,885293835
Dentro de los grupos	8,40618E-05	12	7,00515E-06			
Total	9,53232E-05	14				

Anexo 83. Resumen del análisis de varianza de un factor para el 2-metil-1-butanol 4%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,2075	0,0415	0,0000
Día 2	5	0,1982	0,0396	0,0000
Día 3	5	0,1751	0,0350	0,0001

Anexo 84. Análisis de varianza de un factor para 2-metil-1-butanol 4%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,000111509	2	5,57545E-05	1,409284149	0,282000579	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000474747	12	3,95623E-05			
Total	0,000586256	14				

Anexo 85. Resumen del análisis de varianza de un factor para el 2-metil-1-butanol 5%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,2755	0,0551	0,0000
Día 2	5	0,2813	0,0563	0,0001
Día 3	5	0,2449	0,0490	0,0000

Anexo 86. Análisis de varianza de un factor para 2-metil-1-butanol 5%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,000152683	2	7,63416E-05	1,258234541	0,319096114	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000728083	12	6,06736E-05			
Total	0,000880766	14				

Anexo 87. Resumen del análisis de varianza de un factor para el 2-metil-1-butanol 10%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,4868	0,0974	5,33469E-05
Día 2	5	0,4893	0,0979	4,45817E-05
Día 3	5	0,4940	0,0988	3,85977E-05

Anexo 88. Análisis de varianza de un factor para 2-metil-1-butanol 10%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	5,34241E-06	2	2,67121E-06	0,058696585	0,943261869	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000546105	12	4,55087E-05			
Total	0,000551447	14				

Anexo 89. Resumen del análisis de varianza de un factor para el 2-metil-1-butanol 15%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,7514	0,1503	0,0000
Día 2	5	0,6971	0,1394	0,0005
Día 3	5	0,7430	0,1486	0,0000

Anexo 90. Análisis de varianza de un factor para 2-metil-1-butanol 15%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,00034164	2	0,00017082	0,972258582	0,40613142	3,885293835
Dentro de los grupos	0,002108331	12	0,000175694			
Total	0,002449971	14				

A.7.4 Análisis de muestras

Anexo 91. Análisis de 2-metil-1-butanol en diferentes licores mediante metodología de curvas de calibración día 1.

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción de 2- metil-1-butanol	% 2- metil-1-butanol
C. Ron Márquez del Valle 8 años	1444,0000	0,5000	-0,0017	-0,3401
C. Ron Santa FE	0,0000	0,6000	0,0000	0,0000
C. Ginebra	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Vodka Absolut	0,0000	0,6250	0,0000	0,0000
C. Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	0,0000	0,7000	0,0000	0,0000
C. Chivas Regal	2792,0000	0,6500	-0,0016	-0,2505
C. Muestra Verde	0,0000	0,8000	0,0000	0,0000
C. Muestra Morada	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Aperitivo de Brandy Caravel	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Vino Doña Flor	2209,0000	0,7750	-0,0017	-0,2141
C. Aguardiente Antioqueño	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000
C. Aperitivo de Aguardiente	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 1	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 2	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 3	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000

Anexo 92. Análisis de 2-metil-1-butanol en diferentes licores mediante metodología de curvas de calibración día 2.

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción 2- metil-1-butanol	% 2- metil-1-butanol
C. Ron Márquez del Valle 8 años	1444,0000	0,5000	-0,0030	-0,6025
C. Ron Santa FE	0,0000	0,6000	0,0000	0,0000

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción 2- metil-1- butanol	% 2- metil-1- butanol
C. Ginebra	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Vodka Absolut	0,0000	0,6250	0,0000	0,0000
C. Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	0,0000	0,7000	0,0000	0,0000
C. Chivas Regal	2792,0000	0,6500	-0,0029	-0,4521
C. Muestra Verde	0,0000	0,8000	0,0000	0,0000
C. Muestra Morada	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Aperitivo de Brandy Caravel	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Vino Doña Flor	2209,0000	0,7750	-0,0030	-0,3833
C. Aguardiente Antioqueño	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000
C. Aperitivo de Aguardiente	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 1	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 2	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 3	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000

Anexo 93. Análisis de 2-metil-1-butanol en diferentes licores mediante metodología de curvas de calibración día 3.

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción 2- metil-1- butanol	% 2- metil-1- butanol
C. Ron Márquez del Valle 8 años	1444,0000	0,5000	-0,0026	-0,5180
C. Ron Santa FE	0,0000	0,6000	0,0000	0,0000
C. Ginebra	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Vodka Absolut	0,0000	0,6250	0,0000	0,0000
C. Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	0,0000	0,7000	0,0000	0,0000
C. Chivas Regal	2792,0000	0,6500	-0,0025	-0,3871
C. Muestra Verde	0,0000	0,8000	0,0000	0,0000
C. Muestra Morada	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Aperitivo de Brandy Caravel	0,0000	0,6500	0,0000	0,0000
C. Vino Doña Flor	2209,0000	0,7750	-0,0025	-0,3288
C. Aguardiente Antioqueño	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000
C. Aperitivo de Aguardiente	0,0000	0,5000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 1	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 2	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000
C. Cárcel 3	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000

A.8 2-butanol

A.8.1 Parámetros estadísticos generales

Anexo 94. Parámetros estadísticos para el 2-butanol en cada día de análisis.

2-butanol 1%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0048	0,0025	0,0029
Promedio	0,8800%	0,9200%	0,8200%
Precisión	0,5478	0,2693	0,3531
Exactitud	87,4600%	99,0834%	99,1785%
Límite de cuantificación	0,0485	0,0247	0,0290
Límite de Detección	0,0145	0,0074	0,0087
2-butanol 2%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0034	0,0012	0,0024
Promedio	1,9700%	2,0400%	2,1200%
Precisión	0,1732	0,0569	0,1129
Exactitud	99,0154%	98,9824%	98,9380%
Límite de cuantificación	0,0341	0,0116	0,0240
Límite de Detección	0,0102	0,0035	0,0072
2-butanol 3%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0023	0,0024	0,0029
Promedio	3,0700%	3,0900%	2,9300%
Precisión	0,0739	0,0769	0,0997
Exactitud	98,9779%	98,9695%	99,0225%
Límite de cuantificación	0,0227	0,0238	0,0292
Límite de Detección	0,0068	0,0071	0,0088
2-butanol 4%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0012	0,0082	0,0091
Promedio	4,1300%	4,3200%	3,5100%
Precisión	0,0289	0,1893	0,2585
Exactitud	98,9680%	98,9195%	99,1232%
Límite de cuantificación	0,0119	0,0818	0,0907
Límite de Detección	0,0036	0,0245	0,0272
2-butanol 5%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0035	0,0053	0,0061

Promedio	5,3900%	5,4400%	4,8100%
Precisión	0,0649	0,0972	0,1270
Exactitud	98,9211%	98,9123%	99,0381%
Límite de cuantificación	0,0350	0,0528	0,0611
Límite de Detección	0,0105	0,0159	0,0183
2-butanol 10%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0063	0,0010	0,0022
Promedio	10,0800%	9,8500%	9,9800%
Precisión	0,0623	0,0103	0,0220
Exactitud	98,9922%	99,0151%	99,0016%
Límite de cuantificación	0,0628	0,0101	0,0219
Límite de Detección	0,0188	0,0030	0,0066
2-butanol 15%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0072	0,0126	0,0097
Promedio	14,8700%	13,7600%	14,3700%
Precisión	0,0482	0,0918	0,0676
Exactitud	99,0084%	99,0824%	99,0419%
Límite de cuantificación	0,0717	0,1263	0,0971
Límite de Detección	0,0215	0,0379	0,0291

A.8.3 Análisis multivariado

A.8.3.1 Estimación lineal

Anexo 95. Estimación lineal para el 2-butanol en los 3 días de análisis.

Dia 1				Dia 2				Dia 3			
Estimacion lineal											
b	7,43224E-08	-0,0022195	a	b	6,49924E-08	0,0006755	a	b	6,68831E-08	0,0007717	a
sb	1,26675E-09	0,0012738	sa	sb	1,36933E-09	0,0014775	sa	sb	2,15091E-09	0,0022639	sa
r^2	0,9907897	0,0046021	sy/x	r^2	0,9855626	0,0053213	sy/x	r^2	0,9669972	0,0084908	sy/x
F	3442,3656766	32,0000000	dF	F	2252,7374008	33,0000000	dF	F	966,9143920	33,0000000	dF
ssrg	0,0729078	0,0006777	ssres	ssrg	0,0637892	0,0009344	ssres	ssrg	0,0697092	0,0023791	ssres

A.8.3.2 Análisis de varianza (ANOVA)

Anexo 96. Resumen del análisis de varianza de un factor para el 2-butanol 1%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,0442	0,0088	2,34788E-05
Día 2	5	0,0458	0,0092	6,09233E-06
Día 3	5	0,0459	0,0092	8,41348E-06

Anexo 97. Análisis de varianza de un factor para 2-butanol 1%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	3,64E-07	2	1,82E-07	0,014374231	0,98574553	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000151939	12	1,26615E-05			
Total	0,000152303	14				

Anexo 98. Resumen del análisis de varianza de un factor para el 2-butanol 2%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,0985	0,0197	1,16262E-05
Día 2	5	0,1018	0,0204	1,34212E-06
Día 3	5	0,1062	0,0212	5,7532E-06

Anexo 99. Análisis de varianza de un factor para 2-butanol 2%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	6,03408E-06	2	3,01704E-06	0,483461519	0,628153634	3,885293835
Dentro de los grupos	7,4886E-05	12	6,2405E-06			
Total	8,092E-05	14				

Anexo 100. Resumen del análisis de varianza de un factor para el 2-butanol 3%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,1533	0,0307	5,13753E-06
Día 2	5	0,1546	0,0309	5,64743E-06
Día 3	5	0,1466	0,0293	8,54698E-06

Anexo 101. Análisis de varianza de un factor para 2-butanol 3%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	7,30308E-06	2	3,65154E-06	0,566659114	0,581889701	3,885293835
Dentro de los grupos	7,73278E-05	12	6,44398E-06			

Total	8,46308E-05	14				
-------	-------------	----	--	--	--	--

Anexo 102. Resumen del análisis de varianza de un factor para el 2-butanol 4%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,2064	0,0413	1,41987E-06
Día 2	5	0,2161	0,0432	6,69403E-05
Día 3	5	0,1754	0,0351	8,21776E-05

Anexo 103. Análisis de varianza de un factor para 2-butanol 4%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,000181155	2	9,05773E-05	1,8050741	0,206369408	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000602151	12	5,01793E-05			
Total	0,000783306	14				

Anexo 104. Resumen del análisis de varianza de un factor para el 2-butanol 5%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,2697	0,0539	1,22443E-05
Día 2	5	0,2719	0,0544	2,79238E-05
Día 3	5	0,2405	0,0481	3,72947E-05

Anexo 105. Análisis de varianza de un factor para 2-butanol 5%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,000123255	2	6,16277E-05	2,386734336	0,134075735	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000309851	12	2,58209E-05			
Total	0,000433107	14				

Anexo 106. Resumen del análisis de varianza de un factor para el 2-butanol 10%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	4	0,4031	0,1008	3,94037E-05
Día 2	5	0,4924	0,0985	1,02267E-06
Día 3	5	0,4992	0,0998	4,80537E-06

Anexo 107. Análisis de varianza de un factor para 2-butanol 10%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	1,20354E-05	2	6,01768E-06	0,467729012	0,638329293	3,982297957
Dentro de los grupos	0,000141523	11	1,28657E-05			

Total	0,000153559	13				
-------	-------------	----	--	--	--	--

Anexo 108. Resumen del análisis de varianza de un factor para el 2-butanol 15%

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,7437	0,1487	0,0001
Día 2	5	0,6882	0,1376	0,0002
Día 3	5	0,7186	0,1437	0,0001

Anexo 109. Análisis de varianza de un factor para 2-butanol 15%

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,000308947	2	0,000154474	1,518135845	0,258372621	3,885293835
Dentro de los grupos	0,001221026	12	0,000101752			
Total	0,001529973	14				

Anexo B. Análisis mediante la aplicación de la NTC 4118 por cromatografía de gases.

B.1 Datos de la preparación de las soluciones de trabajo

Anexo 110. Pesos de cada compuesto para la solución stock (A) de partida para día 2.

Fecha de preparación 31/07/2014						
Solución estándar stock (A)						
Compuesto	Volumen (ml)	Peso (g)				
		Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Peso balón vacío	NA	8,5844	8,6185	8,6128	8,6198	8,6106
Peso balón vacío + tapa	NA	10,5273	10,5607	10,5548	10,5619	10,5527
Acetaldehído	0,05	0,0289	0,0298	0,029	0,0288	0,0265
Metanol	0,05	0,0331	0,0333	0,0329	0,0355	0,034
n-Propanol	0,05	0,0386	0,041	0,0389	0,0376	0,0387
isopropanol	0,05	0,0397	0,037	0,0375	0,0368	0,0363
isobutanol	0,05	0,0408	0,0391	0,0394	0,0389	0,03981
2-butanol	0,05	0,0428	0,0391	0,04	0,0395	0,0394
2-metil-1-butanol	0,05	0,0404	0,0398	0,0393	0,0415	0,0403
etanol	Aforo	3,7078	3,6202	3,6918	3,6755	3,67099
Peso total de la solución		3,9721	3,8793	3,9488	3,9341	3,926

Anexo 111. Pesos de cada compuesto para la solución stock (A) de partida para día 3.

Fecha de preparación 01/08/2014						
Solución estándar stock (A)						

Compuesto	Volumen (ml)	Peso (g)				
		Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Peso balón vacío	NA	8,5841	8,6106	8,6134	8,6262	8,6114
Peso balón vacío + tapa	NA	10,527	10,5525	10,5554	10,568	10,5534
Acetaldehído	0,05	0,0296	0,0293	0,0296	0,0302	0,0292
Metanol	0,05	0,0343	0,0326	0,0369	0,0342	0,0352
n-Propanol	0,05	0,0407	0,0449	0,0382	0,0399	0,0384
isopropanol	0,05	0,0378	0,0375	0,036	0,0374	0,0379
isobutanol	0,05	0,0403	0,0406	0,0401	0,0407	0,0393
2-butanol	0,05	0,0396	0,0399	0,039	0,0394	0,0396
2-metil-1-butanol	0,05	0,0448	0,0406	0,0402	0,0393	0,0405
etanol	Aforo	3,7041	3,6669	3,6617	3,6608	3,6959
Peso total de la solución		3,9712	3,9323	3,9217	3,9219	3,956

Anexo 112. Preparación de estándar de partida interno IS, (B) para el día 2.

Fecha de preparación 31/07/2014						
Solución estándar de partida del estándar interno IS (B)						
Compuesto	Volumen (ml)	Peso (g)				
		Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Peso balón vacío	NA	6,9078	6,8774	6,891	6,8705	6,8804
Peso balón vacío + tapa	NA	8,8972	8,9215	8,915	8,9183	8,9187
Peso IS	0,125	0,1097	0,1105	0,1099	0,112	0,1125
Peso total de la solución		3,9218	3,8895	3,905	3,9007	3,9025

Anexo 113. Preparación de estándar de partida interno IS, (B) para el día 3.

Fecha de preparación 01/08/2014						
Solución estándar de partida del estándar interno IS (B)						
Compuesto	Volumen (ml)	Peso (g)				
		Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Peso balón vacío	NA	6,8854	6,9078	6,8945	6,8799	6,886
Peso balón vacío + tapa	NA	8,8757	8,8972	8,889	8,891	8,8856
Peso IS	0,125	0,103	0,0997	0,099	0,099	0,1003
Peso total de la solución		3,9301	3,9124	3,92	3,919	3,9264

Anexo 114. Solución de estándar de trabajo de los factores de respuesta RF (C) el día 2

Fecha de preparación 31/07/2014						
Solución estándar de trabajo de los Factores de Respuesta (C) RF						
Compuesto	Volumen (ml)	Peso (g)				
		Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Peso balón vacío	NA	6,6299	6,6562	6,6681	6,6682	6,6755
Peso balón vacío + tapa	NA	8,6062	8,6318	8,6448	8,6473	8,6524
Solución (A)	0,05	0,0355	0,0357	0,0369	0,035	0,0356
Solución (B)	0,05	0,0369	0,0361	0,037	0,036	0,036
Peso total de la solución		4,7008	4,6715	4,6628	4,6675	4,6461

Anexo 115. Solución de estándar de trabajo de los factores de respuesta RF (C) el día 3

Fecha de preparación 01/08/2014						
Solución estándar de trabajo de los Factores de Respuesta (C) RF						
Compuesto	Volumen (ml)	Peso (g)				
		Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Peso balón vacío	NA	6,63	6,649	6,6579	6,6515	6,6511
Peso balón vacío + tapa	NA	8,6068	8,6249	8,6381	8,6297	8,6287
Solución (A)	0,05	0,0359	0,0346	0,0372	0,0372	0,0362
Solución (B)	0,05	0,036	0,0361	0,0361	0,0364	0,036
Peso total de la solución		4,6802	4,6865	4,6749	4,7029	4,6776

Anexo 116. Solución de estándar interno IS (D) día 2

Fecha de preparación 31/07/2014						
Solución estándar interno IS (D)						
Compuesto	Volumen (ml)	Peso (g)				
		Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Peso balón vacío	NA	6,7605	6,8058	6,7944	6,8759	6,8001
Peso balón vacío + tapa	NA	8,7942	8,8398	8,8305	8,9112	8,8344
solución (B)	0,5	0,3783	0,3888	0,3905	0,3942	0,3915
Peso total de la solución		4,7318	4,6552	4,6764	4,5443	4,6644

Anexo 117. Solución de estándar interno IS (D) día 3

Fecha de preparación 01/08/2014						
Solución estándar interno IS (D)						
Compuesto	Volumen (ml)	Peso (g)				
		Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Peso balón vacío	NA	6,7605	6,776	6,7835	6,7742	6,7803
Peso balón vacío + tapa	NA	8,7942	8,8114	8,8176	8,809	8,815
solución (B)	0,5	0,3731	0,3816	0,3893	0,3887	0,3848
Peso total de la solución		4,7468	4,725	4,6847	5,024	4,6782

Anexo 118. Solución estándar de control de calidad (CC) día 2

Fecha de preparación 31/07/2014					
Solución estándar de control de calidad (CC)					
Compuesto	Peso (g)				
	Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Peso balón vacío	6,8112	6,754	6,76	6,9084	6,961
Peso balón vacío + tapa	8,8653	8,82	8,835	8,897	8,795
Solución estándar stock previa (A)	0,0369	0,0367	0,036	0,0376	0,0354
Peso total de la solución	4,673	4,711	4,776	4,9134	4,7155

Anexo 119. Solución estándar de control de calidad (CC) día 3

Fecha de preparación 01/08/2014					
Solución estándar de control de calidad (CC)					
Compuesto	Peso (g)				
	Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Peso balón vacío	6,7622	6,824	6,767	6,787	6,9118
Peso balón vacío + tapa	8,8165	8,8259	8,8278	8,8256	8,8299
Solución estándar stock previa (A)	0,0353	0,0359	0,0368	0,0363	0,0369
Peso total de la solución	4,7155	4,7108	4,7612	4,7754	4,6741

Anexo 120. Solución de calidad (CC) que contiene la solución (D) día 2

Fecha de preparación 31/07/2014						
Solución de control de calidad (CC) que contiene solución de trabajo del estándar interno IS (D)						
Compuesto	Volumen (ml)	Peso (g)				
		Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Solución (CC)	0,45	0,4212	0,4194	0,4204	0,4193	0,4188
Solución de trabajo IS (D)	0,05	0,0485	0,0477	0,0467	0,0464	0,047
Total=		0,4697	0,4671	0,4671	0,4657	0,4658

Anexo 121. Solución de calidad (CC) que contiene la solución (D) día 3

Fecha de preparación 01/08/2014						
Solución de control de calidad (CC) que contiene solución de trabajo del estándar interno IS (D)						
Compuesto	Volumen (ml)	Peso (g)				
		Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Solución (CC)	0,45	0,4179	0,3595	0,4205	0,42	0,4208
Solución de trabajo IS (D)	0,05	0,0234	0,0257	0,0242	0,0266	0,0249
Total=		0,4413	0,3852	0,4447	0,4466	0,4457

Anexo 122. Resultados obtenidos para la estandarización en el día 2

Resultados					
CÁLCULO DE LA CONCENTRACIÓN DE LOS COMPUESTOS EN LA SOLUCIÓN ESTÁNDAR DE RF (SOLUCIÓN C)					
	Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
F	190,1237647	196,9964938	200,4077168	190,6067704	195,1691405
Concentración (x) mg/Kg					
	Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Metanol	6,293096612	6,559983243	6,593413884	6,766540348	6,635750778
n-Propanol	7,338777318	8,076856245	7,795860185	7,166814566	7,553045739
isopropanol	7,547913459	7,28887027	7,515289382	7,01432915	7,084639802
isobutanol	7,757049601	7,702562907	7,896064044	7,414603368	7,769683485
2-butanol	8,13729713	7,702562907	8,016308674	7,52896743	7,689664137
2-metil-1-butanol	7,681000095	7,840460453	7,876023272	7,910180971	7,865316364
Etanol	704,9408948	713,1667068	739,8652091	700,5751845	716,4639632

CÁLCULO DE LA CONCENTRACIÓN DEL ESTÁNDAR INTERNO (IS) EN LA SOLUCION C					
Concentración IS	219,5714033	219,5428769	223,3220421	221,4591591	223,3693387
CÁLCULO DE LA CONCENTRACIÓN DEL ESTÁNDAR INTERNO IS EN LA SOLUCIÓN DE TRABAJO (SOLUCION D)					
Concentración IS (tr)	2236,305576	2372,774215	2350,098366	2490,721089	2419,611224
CÁLCULO DE LOS FACTORES DE RESPUESTA					
Factor de respuesta RF					
	Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Metanol	0,074924741	0,150411942	0,084126466	0,076986513	0,085057342
n-Propanol	0,095108181	0,178643845	0,095605817	0,095402554	0,097374356
isopropanol	0,034138438	0,033793299	0,034338354	0,027527333	0,081949677
isobutanol	0,090938368	0,163972815	0,091504334	0,091900416	0,090420319
2-butanol	0,09286489	0,167182248	0,092975345	0,097021711	0,091313776
2-metil-1-butanol	0,073159142	0,134607329	0,073249823	0,075699519	0,073829555
Etanol	0,002052953	0,003712867	0,002189	0,002087607	0,002103706
CÁLCULO DE LA CONCENTRACIÓN DE LOS COMPONENTES EN LA SOLUCIÓN DE CONTROL DE CALIDAD (SOLUCIÓN CC)					
Factor X	Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Factor X	0,073571891	0,04050457	0,070468844	0,069478597	0,070872154
Concentración del componente					
Metanol	7,414117223	6,464005628	6,461841337	6,327766305	7,969276524
n-Propanol	7,207207351	7,539799544	7,074092993	6,939972064	7,177175593
isopropanol	13,37191494	6,965736912	6,412427908	8,057617176	29,15590978
isobutanol	7,20567672	7,040147228	6,867337958	6,468118397	6,856862591
2-butanol	7,317334968	6,907077904	6,669798678	6,970124067	6,678695362
2-metil-1-butanol	6,905691589	6,291852594	6,137416288	6,537554028	6,320811255
Etanol	658,0642021	607,9500635	628,1740878	598,1961021	614,8999555

Anexo 123. Resultados obtenidos para la estandarización en el día 3

Resultados					
CÁLCULO DE LA CONCENTRACIÓN DE LOS COMPUESTOS EN LA SOLUCIÓN ESTÁNDAR DE RF (SOLUCIÓN C)					
	Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
F	193,1560326	187,7503841	202,9066	201,6882881	195,6271855
Concentración (x) mg/Kg					
	Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Metanol	6,625251919	6,120662522	7,487255	6,897739453	6,88607693
n-Propanol	7,861450527	8,429992246	7,751033	8,047362695	7,512083924
isopropanol	7,301298033	7,040639404	7,304639	7,543141975	7,414270331
isobutanol	7,784188114	7,622665594	8,136556	8,208713325	7,688148391
2-butanol	7,648978891	7,491240325	7,913359	7,946518551	7,746836546
2-metil-1-butanol	8,653390261	7,622665594	8,156847	7,926349722	7,922901013
Etanol	715,4692604	688,4618834	742,9832	738,3404851	723,0185149
CÁLCULO DE LA CONCENTRACIÓN DEL ESTÁNDAR INTERNO (IS) EN LA SOLUCION C					
Concentración IS	201,591266	196,2955655	195,0222	195,5219728	196,6010405

CÁLCULO DE LA CONCENTRACIÓN DEL ESTÁNDAR INTERNO IS EN LA SOLUCIÓN DE TRABAJO (SOLUCIÓN D)					
Concentración IS (tr)	2059,955976	2058,062035	2098,707	1954,451244	2101,177157
CÁLCULO DE LOS FACTORES DE RESPUESTA					
Factor de respuesta RF					
	Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Metanol	0,080160262	0,046321983	0,084865	0,061604643	0,065550776
n-Propanol	0,112014678	0,063297657	0,117165	0,080632293	0,07456473
isopropanol	0,046946147	0,005366338	0,052777	0,032264368	0,029529276
isobutanol	0,105796055	0,067006531	0,110542	0,0782793	0,068888441
2-butanol	0,103300962	0,069886536	0,115385	0,079409915	0,074648185
2-metil-1-butanol	0,085801019	0,056309989	0,08806	0,060850599	0,058611985
Etanol	0,002495738	0,001461198	0,002717	0,001736299	0,001503258
CÁLCULO DE LA CONCENTRACIÓN DE LOS COMPONENTES EN LA SOLUCIÓN DE CONTROL DE CALIDAD (SOLUCIÓN CC)					
Factor X					
	Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 3	Ensayo 4	Ensayo 5
Factor X	0,05892258	0,095483642	0,055539	0,093415326	0,095820578
Concentración del componente					
Metanol	6,055205818	5,542008475	6,122632	8,085518946	9,635227604
n-Propanol	6,870801735	8,080681965	7,177495	9,151734614	8,187981516
isopropanol	7,341463179	1,330183912	4,364539	8,406008266	7,484059886
isobutanol	6,794816417	7,882369997	7,28137	9,403857416	8,449190692
2-butanol	6,427617723	8,000952072	7,459383	9,265210689	8,926734614
2-metil-1-butanol	6,870584009	8,538172325	7,321514	8,987002487	9,682387909
Etanol	606,5400157	688,8788076	685,3637	804,166252	714,1599088

B.2 Análisis de muestras

Anexo 124. Análisis de diferentes licores mediante metodología NTC 4118 día 2

Promedio Día 2				
Ron Márquez del Valle 8 años				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,4033	0,0000	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,4033	16781,0000	0,0058	10,9548
isopropanol	0,4033	2454,0000	0,0058	0,6054
isobutanol	0,4033	1116,0000	0,0058	0,6853
2-butanol	0,4033	0,0000	0,0012	0,0000
2-metil-1-butanol	0,4033	1677,0000	0,0058	0,8385
Etanol	0,4033	1449257,0000	0,0058	20,4462

Ron Santa FE				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,2346	0,0000	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,2346	0,0000	0,0000	0,0000
isopropanol	0,2346	28120,0000	0,0158	18,9055
isobutanol	0,2346	0,0000	0,0000	0,0000
2-butanol	0,2346	0,0000	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,2346	0,0000	0,0000	0,0000
Etanol	0,2346	1662394,0000	0,0158	63,9169
Ginebra				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,2722	0,0000	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,2722	0,0000	0,0000	0,0000
isopropanol	0,2722	10229,0000	0,0131	5,7050
isobutanol	0,2722	0,0000	0,0000	0,0000
2-butanol	0,2722	0,0000	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,2722	0,0000	0,0000	0,0000
Etanol	0,2722	2048080,0000	0,0131	65,3249
Vodka Absolut				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,3814	0,0000	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,3814	0,0000	0,0000	0,0000
isopropanol	0,3814	7169,0000	0,0098	2,9700
isobutanol	0,3814	0,0000	0,0000	0,0000
2-butanol	0,3814	0,0000	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,3814	0,0000	0,0000	0,0000
Etanol	0,3814	1930821,0000	0,0098	13479978,1710
Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,3613	0,0000	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,3613	0,0000	0,0000	0,0000

isopropanol	0,3613	52402,0000	0,0114	25,2894
isobutanol	0,3613	0,0000	0,0000	0,0000
2-butanol	0,3613	0,0000	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,3613	0,0000	0,0000	0,0000
Etanol	0,3613	425475,0000	0,0114	11,7428
Chivas Regal				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,3544	0,0000	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,3544	1808,0000	0,0103	2,0968
isopropanol	0,3544	28863,0000	0,0103	12,6496
isobutanol	0,3544	1618,0000	0,0103	1,7651
2-butanol	0,3544	0,0000	0,0020	0,0000
2-metil-1-butanol	0,3544	2516,0000	0,0103	2,2349
Etanol	0,3544	1979742,0000	0,0103	49,6196
Muestra Verde				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,2600	0,0000	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,2600	0,0000	0,0000	0,0000
isopropanol	0,2600	21980,0000	0,0136	12,6608
isobutanol	0,2600	0,0000	0,0000	0,0000
2-butanol	0,2600	0,0000	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,2600	0,0000	0,0000	0,0000
Etanol	0,2600	2051576,0000	0,0136	67,5816
Muestra Morada				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,2153	0,0000	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,2153	0,0000	0,0000	0,0000
isopropanol	0,2153	70693,0000	0,0132	39,5793
isobutanol	0,2153	0,0000	0,0000	0,0000
2-butanol	0,2153	0,0000	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,2153	0,0000	0,0000	0,0000
Etanol	0,2153	2604048,0000	0,0132	83,3776

Aperitivo de Brandy Caravel				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,2662	1114,0000	0,0115	1,2054
n-Propanol	0,2662	0,0000	0,0000	0,0000
isopropanol	0,2662	266679,0000	0,0115	129,9735
isobutanol	0,2662	0,0000	0,0000	0,0000
2-butanol	0,2662	0,0000	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,2662	0,0000	0,0000	0,0000
Etanol	0,2662	1249207,0000	0,0115	34,8184
Vino Doña Flor				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,2836	1112,0000	0,0120	1,2614
n-Propanol	0,2836	0,0000	0,0000	0,0000
isopropanol	0,2836	28511,0000	0,0120	18,3042
isobutanol	0,2836	0,0000	0,0000	0,0000
2-butanol	0,2836	0,0000	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,2836	2058,0000	0,0120	2,1312
Etanol	0,2836	945529,0000	0,0120	27,6283
Aguardiente Antioqueño				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,2657	0,0000	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,2657	0,0000	0,0000	0,0000
isopropanol	0,2657	11618,0000	0,0142	6,9945
isobutanol	0,2657	0,0000	0,0000	0,0000
2-butanol	0,2657	0,0000	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,2657	0,0000	0,0000	0,0000
Etanol	0,2657	1473564,0000	0,0142	50,7345
Aperitivo de Aguardiente				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,2744	0,0000	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,2744	0,0000	0,0000	0,0000

isopropanol	0,2744	22462,0000	0,0133	12,6765
isobutanol	0,2744	0,0000	0,0000	0,0000
2-butanol	0,2744	0,0000	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,2744	0,0000	0,0000	0,0000
Etanol	0,2744	948002,0000	0,0133	30,5962
Cárcel 1				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,3993	17718,0000	0,0077	12,7946
n-Propanol	0,3993	0,0000	0,0000	0,0000
isopropanol	0,3993	17318,0000	0,0077	5,6331
isobutanol	0,3993	0,0000	0,0000	0,0000
2-butanol	0,3993	0,0000	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,3993	0,0000	0,0000	0,0000
Etanol	0,3993	879825,0000	0,0077	16,3663
Cárcel 2				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,3359	1253774,0000	0,0100	1349,3559
n-Propanol	0,3359	0,0000	0,0000	0,0000
isopropanol	0,3359	36983,0000	0,0100	15,7004
isobutanol	0,3359	0,0000	0,0000	0,0000
2-butanol	0,3359	0,0000	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,3359	0,0000	0,0000	0,0000
Etanol	0,3359	552261,0000	0,0100	13,4079
Cárcel 3				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,3318	1037596,0000	0,0097	944,9186
n-Propanol	0,3318	0,0000	0,0000	0,0000
isopropanol	0,3318	24104,0000	0,0097	9,8876
isobutanol	0,3318	0,0000	0,0000	0,0000
2-butanol	0,3318	0,0000	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,3318	0,0000	0,0000	0,0000
Etanol	0,3318	498340,0000	0,0097	11,6905

Anexo 125. Análisis de diferentes licores mediante metodología NTC 4118 día 3

Promedio Día 3				
Ron Márquez del Valle 8 años				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,4033	0,0000	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,4033	16781,0000	0,0052	7,7783
isopropanol	0,4033	2454,0000	0,0052	0,4242
isobutanol	0,4033	1116,0000	0,0052	0,4974
2-butanol	0,4033	0,0000	0,0010	0,0000
2-metil-1-butanol	0,4033	1677,0000	0,0052	0,6071
Etanol	0,4033	1449257,0000	0,0052	14,8759
Ron Santa FE				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,2346	0,0000	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,2346	0,0000	0,0000	0,0000
isopropanol	0,2346	28120,0000	0,0141	13,2478
isobutanol	0,2346	0,0000	0,0000	0,0000
2-butanol	0,2346	0,0000	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,2346	0,0000	0,0000	0,0000
Etanol	0,2346	1662394,0000	0,0141	46,5035
Ginebra				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,2722	0,0000	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,2722	0,0000	0,0000	0,0000
isopropanol	0,2722	10229,0000	0,0117	3,9977
isobutanol	0,2722	0,0000	0,0000	0,0000
2-butanol	0,2722	0,0000	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,2722	0,0000	0,0000	0,0000
Etanol	0,2722	2048080,0000	0,0117	47,5279
Vodka Absolut				

Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,3814	0,0000	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,3814	0,0000	0,0000	0,0000
isopropanol	0,3814	7169,0000	0,0087	2,0812
isobutanol	0,3814	0,0000	0,0000	0,0000
2-butanol	0,3814	0,0000	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,3814	0,0000	0,0000	0,0000
Etanol	0,3814	1930821,0000	0,0087	12101144,4572
Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,3613	0,0000	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,3613	0,0000	0,0000	0,0000
isopropanol	0,3613	52402,0000	0,0101	17,7212
isobutanol	0,3613	0,0000	0,0000	0,0000
2-butanol	0,3613	0,0000	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,3613	0,0000	0,0000	0,0000
Etanol	0,3613	425475,0000	0,0101	8,5436
Chivas Regal				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,3544	0,0000	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,3544	1808,0000	0,0092	1,4888
isopropanol	0,3544	28863,0000	0,0092	8,8641
isobutanol	0,3544	1618,0000	0,0092	1,2812
2-butanol	0,3544	0,0000	0,0019	0,0000
2-metil-1-butanol	0,3544	2516,0000	0,0092	1,6180
Etanol	0,3544	1979742,0000	0,0092	36,1013
Muestra Verde				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,2600	0,0000	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,2600	0,0000	0,0000	0,0000
isopropanol	0,2600	21980,0000	0,0121	8,8719

isobutanol	0,2600	0,0000	0,0000	0,0000
2-butanol	0,2600	0,0000	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,2600	0,0000	0,0000	0,0000
Etanol	0,2600	2051576,0000	0,0121	49,1698
Muestra Morada				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,2153	0,0000	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,2153	0,0000	0,0000	0,0000
isopropanol	0,2153	70693,0000	0,0117	27,7347
isobutanol	0,2153	0,0000	0,0000	0,0000
2-butanol	0,2153	0,0000	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,2153	0,0000	0,0000	0,0000
Etanol	0,2153	2604048,0000	0,0117	60,6623
Aperitivo de Brandy Caravel				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,2662	1114,0000	0,0102	0,7712
n-Propanol	0,2662	0,0000	0,0000	0,0000
isopropanol	0,2662	266679,0000	0,0102	91,0771
isobutanol	0,2662	0,0000	0,0000	0,0000
2-butanol	0,2662	0,0000	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,2662	0,0000	0,0000	0,0000
Etanol	0,2662	1249207,0000	0,0102	25,3325
Vino Doña Flor				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,2836	1112,0000	0,0107	0,8070
n-Propanol	0,2836	0,0000	0,0000	0,0000
isopropanol	0,2836	28511,0000	0,0107	10,0421
isobutanol	0,2836	0,0000	0,0000	0,0000
2-butanol	0,2836	0,0000	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,2836	2058,0000	0,0107	1,5430
Etanol	0,2836	945529,0000	0,0107	20,1013
Aguardiente Antioqueño				

Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,2657	0,0000	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,2657	0,0000	0,0000	0,0000
isopropanol	0,2657	11618,0000	0,0126	4,9013
isobutanol	0,2657	0,0000	0,0000	0,0000
2-butanol	0,2657	0,0000	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,2657	0,0000	0,0000	0,0000
Etanol	0,2657	1473564,0000	0,0126	36,9124
Aperitivo de Aguardiente				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,2744	0,0000	0,0000	0,0000
n-Propanol	0,2744	0,0000	0,0000	0,0000
isopropanol	0,2744	22462,0000	0,0118	8,8829
isobutanol	0,2744	0,0000	0,0000	0,0000
2-butanol	0,2744	0,0000	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,2744	0,0000	0,0000	0,0000
Etanol	0,2744	948002,0000	0,0118	22,2606
Cárcel 1				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,3993	17718,0000	0,0068	8,1858
n-Propanol	0,3993	0,0000	0,0000	0,0000
isopropanol	0,3993	17318,0000	0,0068	3,9473
isobutanol	0,3993	0,0000	0,0000	0,0000
2-butanol	0,3993	0,0000	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,3993	0,0000	0,0000	0,0000
Etanol	0,3993	879825,0000	0,0068	11,9075
Cárcel 2				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,3359	1253774,0000	0,0089	670,8557
n-Propanol	0,3359	0,0000	0,0000	0,0000
isopropanol	0,3359	36983,0000	0,0089	11,0018

isobutanol	0,3359	0,0000	0,0000	0,0000
2-butanol	0,3359	0,0000	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,3359	0,0000	0,0000	0,0000
Etanol	0,3359	552261,0000	0,0089	9,7551
Cárcel 3				
Componente	Peso del compuesto	Área del pico	Factor X	Concentración del componente
Metanol	0,3318	1037596,0000	0,0086	604,5445
n-Propanol	0,3318	0,0000	0,0000	0,0000
isopropanol	0,3318	24104,0000	0,0086	6,9286
isobutanol	0,3318	0,0000	0,0000	0,0000
2-butanol	0,3318	0,0000	0,0000	0,0000
2-metil-1-butanol	0,3318	0,0000	0,0000	0,0000
Etanol	0,3318	498340,0000	0,0086	8,5056

B.3 Ecuaciones sugeridas en la NTC 4118 para la determinación de la composición

B.3.1 Cálculo de la concentración de los compuestos en la solución estándar de RF (solución C).

$$F = \frac{\text{Peso de la solución A adicionada a la solución C(g)}}{(\text{Peso total de la solución A(g)}) (\text{Peso total de la solución C(g)})} \times 10^5$$

$$\begin{aligned} \text{Concentración (X) expresada en } \frac{mg}{kg} \\ = (\text{Factor F})(\text{Peso del compuesto en la solución A})(g) \end{aligned}$$

B.3.2 Cálculo de la concentración del estándar interno (IS) en la solución C.

$$\begin{aligned} \text{Concentración IS} \\ = \frac{\text{Peso IS en la solución B(g)}}{\text{Peso total de la solución B(g)}} \times \frac{\text{Peso de la solución B en la solución C (g)}}{\text{Peso total de la solución C (g)}} \times 10^6 \end{aligned}$$

B.3.3 Cálculo de la concentración del estándar interno IS en la solución de trabajo (solución D).

Concentración IS_{tr}

$$= \frac{(\text{Peso IS en la solución B(g)}) (\text{Peso de la solución B(g) en la solución D(g)}) (10^6)}{(\text{Peso total solución B(g)}) (\text{Peso total de la solución D(g)})}$$

B.3.4 Cálculo de los factores de respuesta.

Factor de respuesta RF

$$= \frac{(\text{Altura del pico IS(mm)}) \left(\text{Concentración del compuesto} \left(\frac{\text{mg}}{\text{kg}} \right) \right)}{(\text{Altura del pico del compuesto (mm)}) \left(\text{Concentración IS} \left(\frac{\text{mg}}{\text{kg}} \right) \right)}$$

Nota: “Si se cuenta con un buen sistema de medición de áreas, estas se deben emplear en los cálculos en lugar de las alturas correspondientes”

B.3.5 Cálculo de la concentración de los componentes en la solución de control de calidad (solución CC).

$$\text{Factor } X = \frac{\text{Peso de la solución D (g)}}{\text{Peso de la muestra (g)}} \times \frac{\text{Concentración IS}}{\text{Altura del pico IS}}$$

Concentración de lcomponente

$$= (\text{Factor (X)}) (\text{Altura del pico del componente}) (RF)$$

Anexo C. Análisis de curvas de calibración mediante espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier (FT-IR).

C.1 Etanol a 1043 cm^{-1}

C.2.2 Parámetros estadísticos generales

Anexo 126. Parámetros estadísticos generales de etanol a 1043 cm^{-1}

Etanol 15%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3

Desviación estándar	0,0055	0,0046	0,0026
Promedio	12,1480%	11,9348%	12,6120%
Precisión	0,0451	0,0389	0,0203
Exactitud	99,1901%	99,2043%	99,1592%
Límite de cuantificación	0,0547	0,0465	0,0256
Límite de Detección	0,0164	0,0139	0,0077
Etanol 25%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0045	0,0065	0,0044
Promedio	17,0451%	16,3537%	17,8642%
Precisión	0,0266	0,0395	0,0245
Exactitud	99,3182%	99,3459%	99,2854%
Límite de cuantificación	0,0454	0,0646	0,0438
Límite de Detección	0,0136	0,0194	0,0131
Etanol 35%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0088	0,0107	0,0081
Promedio	22,0234%	22,4822%	24,1839%
Precisión	0,0399	0,0478	0,0334
Exactitud	99,3708%	99,3577%	99,3090%
Límite de cuantificación	0,0878	0,1074	0,0807
Límite de Detección	0,0263	0,0322	0,0242
Etanol 55%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0143	0,0118	0,0082
Promedio	34,3658%	34,7581%	35,4860%
Precisión	0,0415	0,0338	0,0231
Exactitud	99,3752%	99,3680%	99,3548%
Límite de cuantificación	0,1428	0,1176	0,0819
Límite de Detección	0,0428	0,0353	0,0246
Etanol 65%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0084	0,0119	0,0052
Promedio	40,7164%	40,7362%	43,9062%
Precisión	0,0207	0,0293	0,0118
Exactitud	99,3736%	99,3733%	99,3245%

Límite de cuantificación	0,0844	0,1192	0,0519
Límite de Detección	0,0253	0,0358	0,0156
Etanol 80%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0116	0,0017	0,0025
Promedio	50,0349%	51,3136%	53,2517%
Precisión	0,0232	0,0033	0,0047
Exactitud	99,3746%	99,3586%	99,3344%
Límite de cuantificación	0,1162	0,0171	0,0251
Límite de Detección	0,0349	0,0051	0,0075

C.1.1 Análisis de muestras

Anexo 127. Análisis de etanol (1043 cm^{-1}) en diferentes licores mediante la metodología de curvas de calibración FT-IR día 2

Muestra	Absorbancia	factor de dilución	Fracción de etanol	% Etanol	% Recuperación
Ron Márquez del Valle 8 años	0,1407	0,5000	0,2048	40,9674	117,0497
Ron Santa FE	0,1244	0,6000	0,1778	29,6328	84,6651
Ginebra	0,1603	0,6500	0,2372	36,4869	91,2172
Vodka Absolut	0,1515	0,6250	0,2226	35,6147	89,0367
Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	0,0574	0,7000	0,0669	9,5594	32,9633
Chivas Regal	0,1493	0,6500	0,2190	33,6924	84,2310
Muestra Verde	0,1563	0,8000	0,2306	28,8261	0,0000
Muestra Morada	0,1639	0,6500	0,2432	37,4206	0,0000
Aperitivo de Brandy Caravel	0,0933	0,6500	0,1264	19,4404	129,6025
Aperitivo de Aguardiente	0,0890	0,5000	0,1193	23,8531	159,0206
Cárcel 1	0,0806	1,0000	0,1054	10,5391	0,0000
Cárcel 2	0,0609	1,0000	0,0727	7,2704	0,0000
Cárcel 3	0,0595	1,0000	0,0704	7,0379	0,0000

Anexo 128. Análisis de etanol (1043 cm^{-1}) en diferentes licores mediante la metodología de curvas de calibración FT-IR día 3

Muestra	Absorbancia	factor de dilución	Fracción de etanol	% Etanol	% Recuperación
Ron Márquez del Valle 8 años	0,1407	0,5000	0,1828	36,5686	104,4816
Ron Santa FE	0,1244	0,6000	0,1566	26,0993	74,5695
Ginebra	0,1603	0,6500	0,2142	32,9572	82,3930
Vodka Absolut	0,1515	0,6250	0,2001	32,0123	80,0307
Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	0,0574	0,7000	0,0490	6,9955	24,1224
Chivas Regal	0,1493	0,6500	0,1966	30,2447	75,6119

Muestra	Absorbancia	factor de dilución	Fracción de etanol	% Etanol	% Recuperación
Muestra Verde	0,1563	0,8000	0,2079	25,9823	0,0000
Muestra Morada	0,1639	0,6500	0,2201	33,8635	0,0000
Aperitivo de Brandy Caravel	0,0933	0,6500	0,1067	16,4109	109,4061
Aperitivo de Aguardiente	0,0890	0,5000	0,0998	19,9564	133,0429
Cárcel 1	0,0806	1,0000	0,0863	8,6315	0,0000
Cárcel 2	0,0609	1,0000	0,0546	5,4587	0,0000
Cárcel 3	0,0595	1,0000	0,0523	5,2330	0,0000

C.2 Etanol 3274 cm⁻¹

C.2.2 Parámetros estadísticos generales

Anexo 129. Parámetros estadísticos generales de etanol a 3274 cm⁻¹

Etanol 5%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,1590	0,0014	0,0010
Promedio	0,2947	0,3729	0,3481
Precisión	53,9528	0,3843	0,2749
Exactitud	94,1066	492,5426	493,0374
Límite de cuantificación	1,5898	0,0143	0,0096
Límite de Detección	0,4769	0,0043	0,0029
Etanol 15%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,1509	0,0021	0,0008
Promedio	0,2781	0,3589	0,3379
Precisión	0,5427	0,0060	0,0023
Exactitud	98,1458	97,6076	97,7474
Límite de cuantificación	1,5094	0,0215	0,0079
Límite de Detección	0,4528	0,0064	0,0024
Etanol 25%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,1477	0,0020	0,0013
Promedio	0,2720	0,3412	0,3224
Precisión	0,5431	0,0058	0,0041
Exactitud	98,9121	98,6354	98,7103
Límite de cuantificación	1,4771	0,0199	0,0133

Límite de Detección	0,4431	0,0060	0,0040
Etanol 35%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,1389	0,0051	0,0034
Promedio	0,2544	0,3179	0,2973
Precisión	0,5461	0,0161	0,0115
Exactitud	99,2732	99,0916	99,1506
Límite de cuantificación	1,3891	0,0512	0,0341
Límite de Detección	0,4167	0,0154	0,0102
Etanol 55%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,1138	0,0058	0,0079
Promedio	0,2068	0,2601	0,2478
Precisión	0,5505	0,0223	0,0320
Exactitud	99,6240	99,5272	99,5495
Límite de cuantificación	1,1385	0,0579	0,0793
Límite de Detección	0,3415	0,0174	0,0238
Etanol 65%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0981	0,0065	0,0032
Promedio	0,1778	0,2263	0,2176
Precisión	0,5517	0,0289	0,0149
Exactitud	99,7265	99,6519	99,6652
Límite de cuantificación	0,9809	0,0655	0,0325
Límite de Detección	0,2943	0,0196	0,0097
Etanol 80%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0726	0,0007	0,0009
Promedio	0,1401	0,1709	0,1665
Precisión	0,5186	0,0040	0,0057
Exactitud	99,8249	99,7864	99,7919
Límite de cuantificación	0,7265	0,0068	0,0094
Límite de Detección	0,2179	0,0020	0,0028

C.2.3 Análisis multivariado

C.2.3.2 Análisis de varianza de un factor (ANOVA)

Anexo 130. Resumen del análisis de varianza de un factor para Etanol 15% a 1043 cm⁻¹

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,6074	0,1215	2,99632E-05
Día 2	5	0,5967	0,1193	2,15974E-05
Día 3	5	0,6306	0,1261	6,53976E-06

Anexo 131. Análisis de varianza de un solo factor para el Etanol 15% a 1043 cm⁻¹

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,0001199	2	5,995E-05	3,095478685	0,082405109	3,885294
Dentro de los grupos	0,0002324	12	1,9367E-05			
Total	0,0003523	14				

Anexo 132. Resumen del análisis de varianza de un factor para etanol 25% a 1043 cm⁻¹

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,8523	0,1705	2,05752E-05
Día 2	5	0,8177	0,1635	4,17064E-05
Día 3	5	0,8932	0,1786	1,9165E-05

Anexo 133. Análisis de varianza de un solo factor para el etanol 25% a 1043 cm⁻¹

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,00057173	2	0,00028587	10,52954508	0,0022874	3,88529383
Dentro de los grupos	0,00032579	12	2,7149E-05			
Total	0,00089752	14				

Anexo 134. Resumen del análisis de varianza de un factor para etanol 35% a 1043 cm⁻¹

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	1,1012	0,2202	0,0001
Día 2	5	1,1241	0,2248	0,0001
Día 3	5	1,2092	0,2418	0,0001

Anexo 135. Análisis de varianza de un solo factor para el etanol 35% a 1043 cm⁻¹

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,00129567	2	0,00064783	7,541297795	0,00756738	3,88529383
Dentro de los grupos	0,00103086	12	8,5905E-05			
Total	0,00232652	14				

Anexo 136. Resumen del análisis de varianza de un factor para etanol 55% a 1043 cm⁻¹

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	1,7183	0,3437	0,0002
Día 2	5	1,7379	0,3476	0,0001
Día 3	5	1,7743	0,3549	0,0001

Anexo 137. Análisis de varianza de un solo factor para el etanol 55% a 1043 cm⁻¹

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,0003231	2	0,00016155	1,18462628	0,33922075	3,88529383
Dentro de los grupos	0,00163644	12	0,00013637			
Total	0,00013476	14				

Anexo 138. Resumen del análisis de varianza de un factor para etanol 65% a 1043 cm⁻¹

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	2,0358	0,4072	0,0001
Día 2	5	2,0368	0,4074	0,0001
Día 3	5	2,1953	0,4391	0,0000

Anexo 139. Análisis de varianza de un solo factor para el etanol 65% a 1043 cm⁻¹

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,00337063	2	0,00168532	21,04466421	0,000119239	3,885294
Dentro de los grupos	0,00096099	12	8,0083E-05			
Total	0,00433163	14				

Anexo 140. Resumen del análisis de varianza de un factor para etanol 80% a 1043 cm⁻¹

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	2,5017	0,5003	0,0001
Día 2	5	2,5657	0,5131	0,0000
Día 3	5	2,6626	0,5325	0,0000

Anexo 141. Análisis de varianza de un solo factor para el etanol 80% a 1043 cm⁻¹

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,00262324	2	0,00131162	27,26640206	3,4425E-05	3,88529383
Dentro de los grupos	0,00057725	12	4,8104E-05			
Total	0,00320049	14				

C.2.3.1 Estimación lineal

Anexo 142. Estimación lineal para el etanol a 3274 cm⁻¹ en los tres días de análisis

Dia 1				Dia 2				Dia 3			
Estimacion lineal											
b	-3,694132389	1,465727481	a	b	-3,522801267	1,439355899	a	b	-3,996040767	1,5094305	a
sb	0,256425432	0,076015607	sa	sb	0,267038128	0,081057432	sa	sb	0,270176693	0,076921805	sa
r^2	0,976475064	0,046268446	sy/x	r^2	0,972072071	0,050412712	sy/x	r^2	0,977654436	0,04509375	sy/x
F	207,5404332	5	dF	F	174,0322517	5	dF	F	218,7580577	5	dF
ssrg	0,444296154	0,010703846	ssres	ssrg	0,442292792	0,012707208	ssres	ssrg	0,444832768	0,010167232	ssres

C.2.3.2 Análisis de varianza de un factor (ANOVA)

Anexo 143. Resumen del análisis de varianza de un factor para el etanol 5% a 3274 cm⁻¹

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	1,4733	0,2947	2,53E-02
Día 2	5	1,8643	0,3729	2,05E-06
Día 3	5	1,7406	0,3481	9,16E-07

Anexo 144. Análisis de varianza de un solo factor para el etanol 5% a 3274 cm⁻¹

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,015974775	2	0,007987388	0,947928531	0,414739545	3,885293835
Dentro de los grupos	0,101113796	12	0,00842615			
Total	0,117088571	14				

Anexo 145. Resumen del análisis de varianza de un factor para el etanol 15% a 3274 cm⁻¹

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	1,3907	0,2781	0,022784085
Día 2	5	1,7943	0,3589	4,60749E-06
Día 3	5	1,6895	0,3379	6,22152E-07

Anexo 146. Análisis de varianza de un solo factor para el etanol 15% a 3274 cm⁻¹

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,017547978	2	0,008773989	1,155013543	0,347732067	3,885293835
Dentro de los grupos	0,091157258	12	0,007596438			
Total	0,108705235	14				

Anexo 147. Resumen del análisis de varianza de un factor para el etanol 25% a 3274 cm⁻¹

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	1,3599	0,2720	2,18E-02
Día 2	5	1,7058	0,3412	3,95E-06
Día 3	5	1,6121	0,3224	1,78E-06

Anexo 148. Análisis de varianza de un solo factor para el etanol 25% a 3274 cm⁻¹

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,012797258	2	0,006398629	0,879536846	0,44010094	3,885293835
Dentro de los grupos	0,087299982	12	0,007274998			
Total	0,10009724	14				

Anexo 149. Resumen del análisis de varianza de un factor para el etanol 35% a 3274 cm⁻¹

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	1,2718	0,2544	1,93E-02
Día 2	5	1,5896	0,3179	2,62E-05
Día 3	5	1,4865	0,2973	1,16E-05

Anexo 150. Análisis de varianza de un solo factor para el etanol 35% a 3274 cm⁻¹

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,010514996	2	0,005257498	0,815757029	0,465396274	3,885293835
Dentro de los grupos	0,077339179	12	0,006444932			
Total	0,087854175	14				

Anexo 151. Resumen del análisis de varianza de un factor para el etanol 55% a 3274 cm⁻¹

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	1,0340	0,2068	1,30E-02
Día 2	5	1,3003	0,2601	3,36E-05
Día 3	5	1,2389	0,2478	6,28E-05

Anexo 152. Análisis de varianza de un solo factor para el etanol 55% a 3274 cm⁻¹

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,007778104	2	0,003889052	0,893486922	0,434784213	3,885293835
Dentro de los grupos	0,052232016	12	0,004352668			
Total	0,06001012	14				

Anexo 153. Resumen del análisis de varianza de un factor para el etanol 65% a 3274 cm⁻¹

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,8890	0,1778	9,62E-03
Día 2	5	1,1313	0,2263	4,28E-05
Día 3	5	1,0881	0,2176	1,06E-05

Anexo 154. Análisis de varianza de un solo factor para el etanol 65% a 3274 cm⁻¹

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,006684011	2	0,003342006	1,036223029	0,384476607	3,885293835
Dentro de los grupos	0,038702158	12	0,00322518			
Total	0,045386169	14				

Anexo 155. Resumen del análisis de varianza de un factor para el etanol 80% a 3274 cm⁻¹

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,7005	0,1401	5,28E-03
Día 2	5	0,8546	0,1709	4,66E-07
Día 3	5	0,8323	0,1665	8,91E-07

Anexo 156. Análisis de varianza de un solo factor para el etanol 80% a 3274 cm⁻¹

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,002774479	2	0,00138724	0,788360124	0,476780254	3,885293835
Dentro de los grupos	0,021115828	12	0,001759652			
Total	0,023890307	14				

C.2.4 Análisis de muestras

Anexo 157. Análisis de etanol (3274 cm⁻¹) en diferentes licores mediante la metodología de curvas de calibración FT-IR día 1.

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción de etanol	% etanol	% Recuperación
C. Ron Márquez del Valle 8 años	0,3490	0,5000	0,1765	35,3078	100,8793
C. Ron Santa FE	0,3502	0,6000	0,1721	28,6799	81,9427
C. Ginebra	0,3424	0,6500	0,2009	30,9063	77,2659
C. Vodka Absolut	0,3443	0,6250	0,1937	30,9970	77,4924

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción de etanol	% etanol	% Recuperación
C. Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	0,3637	0,7000	0,1220	17,4331	60,1141
C. Chivas Regal	0,3392	0,6500	0,2125	32,6945	81,7362
C. Muestra Verde	0,3412	0,8000	0,2052	25,6463	0,0000
C. Muestra Morada	0,3364	0,6500	0,2231	34,3189	0,0000
C. Aperitivo de Brandy Caravel	0,3511	0,6500	0,1687	25,9571	173,0471
C. Aperitivo de Aguardiente	0,3575	0,5000	0,1450	28,9982	193,3214
C. Cárcel 1	0,3537	1,0000	0,1592	15,9177	0,0000
C. Cárcel 2	0,3287	1,0000	0,2515	25,1529	0,0000
C. Cárcel 3	0,3361	1,0000	0,2243	22,4280	0,0000

Anexo 158. Análisis de etanol (3274 cm^{-1}) en diferentes licores mediante la metodología de curvas de calibración FT-IR día 2.

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción de etanol	% etanol	% Recuperación
C. Ron Márquez del Valle 8 años	0,34898	0,50000	0,20996	41,99176	119,97647
C. Ron Santa FE	0,35019	0,60000	0,20571	34,28442	97,95547
C. Ginebra	0,34239	0,65000	0,23318	35,87413	89,68531
C. Vodka Absolut	0,34433	0,62500	0,22635	36,21660	90,54149
C. Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	0,36374	0,70000	0,15798	22,56853	77,82252
C. Chivas Regal	0,33924	0,65000	0,24427	37,57934	93,94834
C. Muestra Verde	0,34123	0,80000	0,23726	29,65782	0,00000
C. Muestra Morada	0,33639	0,65000	0,25433	39,12843	0,00000
C. Aperitivo de Brandy Caravel	0,35110	0,65000	0,20250	31,15439	207,69595
C. Aperitivo de Aguardiente	0,35752	0,50000	0,17987	35,97485	239,83234
C. Cárcel 1	0,35368	1,00000	0,19340	19,34024	0,00000
C. Cárcel 2	0,32868	1,00000	0,28147	28,14707	0,00000
C. Cárcel 3	0,33606	1,00000	0,25549	25,54855	0,00000

Anexo 159. Análisis de etanol (3274 cm^{-1}) en diferentes licores mediante la metodología de curvas de calibración FT-IR día 3.

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción de etanol	% etanol	% Recuperación
C. Ron Márquez del Valle 8 años	0,3490	0,5000	0,1149	22,9762	65,6463
C. Ron Santa FE	0,3502	0,6000	0,1101	18,3429	52,4083
C. Ginebra	0,3424	0,6500	0,1412	21,7267	54,3168
C. Vodka Absolut	0,3443	0,6250	0,1335	21,3565	53,3913
C. Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	0,3637	0,7000	0,0559	7,9885	27,5464
C. Chivas Regal	0,3392	0,6500	0,1538	23,6610	59,1525

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción de etanol	% etanol	% Recuperación
C. Muestra Verde	0,3412	0,8000	0,1459	18,2316	0,0000
C. Muestra Morada	0,3364	0,6500	0,1652	25,4182	0,0000
C. Aperitivo de Brandy Caravel	0,3511	0,6500	0,1064	16,3730	109,1530
C. Aperitivo de Aguardiente	0,3575	0,5000	0,0808	16,1510	107,6733
C. Cárcel 1	0,3537	1,0000	0,0961	9,6100	0,0000
C. Cárcel 2	0,3287	1,0000	0,1960	19,6000	0,0000
C. Cárcel 3	0,3361	1,0000	0,1665	16,6524	0,0000

C.3 Metanol 1013 cm⁻¹

C.3.2 Parámetros estadísticos generales

Anexo 160. Parámetros estadísticos generales de metanol a 1013 cm⁻¹

Metanol 5%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0015	0,0007	0,0006
Promedio	5,8896%	6,2385%	6,1552%
Precisión	0,0263	0,0115	0,0099
Exactitud	98,8221%	98,7523%	98,7690%
Límite de cuantificación	0,0155	0,0071	0,0061
Límite de Detección	0,0046	0,0021	0,0018
Metanol 15%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0030	0,0031	0,0018
Promedio	8,4199%	9,2075%	9,1276%
Precisión	0,0361	0,0333	0,0200
Exactitud	99,4387%	99,3862%	99,3915%
Límite de cuantificación	0,0304	0,0307	0,0183
Límite de Detección	0,0091	0,0092	0,0055
Metanol 25%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0087	0,0009	0,0014
Promedio	11,8230%	12,4557%	12,7116%
Precisión	0,0739	0,0074	0,0114
Exactitud	99,5271%	99,5018%	99,4915%

Límite de cuantificación	0,0874	0,0092	0,0145
Límite de Detección	0,0262	0,0028	0,0043
Metanol 35%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0094	0,0049	0,0090
Promedio	17,6373%	19,3931%	18,9166%
Precisión	0,0530	0,0255	0,0478
Exactitud	99,4961%	99,4459%	99,4595%
Límite de cuantificación	0,0935	0,0494	0,0904
Límite de Detección	0,0281	0,0148	0,0271
Metanol 55%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0173	0,0071	0,0097
Promedio	29,8002%	32,3029%	31,2749%
Precisión	0,0582	0,0221	0,0309
Exactitud	99,4582%	99,4127%	99,4314%
Límite de cuantificación	0,1735	0,0714	0,0967
Límite de Detección	0,0520	0,0214	0,0290
Metanol 65%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0233	0,0036	0,0187
Promedio	40,9997%	44,9333%	44,1990%
Precisión	0,0568	0,0081	0,0424
Exactitud	99,3692%	99,3087%	99,3200%
Límite de cuantificación	0,2329	0,0363	0,1874
Límite de Detección	0,0699	0,0109	0,0562
Metanol 80%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0322	0,0100	0,0380
Promedio	54,8255%	57,6596%	56,7848%
Precisión	0,0588	0,0173	0,0670
Exactitud	99,3147%	99,2793%	99,2902%
Límite de cuantificación	0,3225	0,0998	0,3802
Límite de Detección	0,0967	0,0299	0,1141

C.3.3 Análisis multivariado

C.3.3.1 Estimación lineal

Anexo 161. Estimación lineal para el metanol a 1013 cm^{-1} en los tres días de análisis

Dia 1				Dia 2				Dia 3			
Estimacion lineal											
b	1,528419685	0,040923449	a	b	1,38350832	0,043128076	a	b	1,53747575	0,020489878	a
sb	0,121074157	0,034706645	sa	sb	0,119528939	0,037660822	sa	sb	0,113364059	0,033571821	sa
r^2	0,969579178	0,052614587	sy/x	r^2	0,964021799	0,05721902	sy/x	r^2	0,973535955	0,049073701	sy/x
F	159,3611077	5	dF	F	133,9730424	5	dF	F	183,935591	5	dF
ssrg	0,441158526	0,013841474	ssres	ssrg	0,438629919	0,016370081	ssres	ssrg	0,442958859	0,012041141	ssres

C.3.3.2 Análisis de varianza de un factor (ANOVA)

Anexo 162. Resumen del análisis de varianza de un factor para el metanol 5% a 1013 cm^{-1}

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,2945	0,0589	2,39795E-06
Día 2	5	0,3119	0,0624	5,10291E-07
Día 3	5	0,3078	0,0616	3,72324E-07

Anexo 163. Análisis de varianza de un solo factor para el etanol 5% a 1013 cm^{-1}

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	3,32064E-05	2	1,66032E-05	15,18325298	0,000516359	3,885293835
Dentro de los grupos	1,31223E-05	12	1,09352E-06			
Total	4,63287E-05	14				

Anexo 164. Resumen del análisis de varianza de un factor para el metanol 15% a 1013 cm^{-1}

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,4210	0,0842	9,21699E-06
Día 2	5	0,4604	0,0921	9,42089E-06
Día 3	5	0,4564	0,0913	3,34403E-06

Anexo 165. Análisis de varianza de un solo factor para el metanol 15% a 1013 cm⁻¹

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,000187917	2	9,39587E-05	12,82309487	0,001048966	3,885293835
Dentro de los grupos	8,79276E-05	12	7,3273E-06			
Total	0,000275845	14				

Anexo 166. Resumen del análisis de varianza de un factor para el metanol 25% a 1013 cm⁻¹

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,5912	0,1182	7,64256E-05
Día 2	5	0,6228	0,1246	8,42356E-07
Día 3	5	0,6356	0,1271	2,09819E-06

Anexo 167. Análisis de varianza de un solo factor para el metanol 25% a 1013 cm⁻¹

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,000209228	2	0,000104614	3,954347957	0,047954636	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000317464	12	2,64554E-05			
Total	0,000526692	14				

Anexo 168. Resumen del análisis de varianza de un factor para el metanol 35% a 1013 cm⁻¹

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	0,8819	0,1764	8,74795E-05
Día 2	5	0,9697	0,1939	2,43905E-05
Día 3	5	0,9458	0,1892	8,16485E-05

Anexo 169. Análisis de varianza de un solo factor para el metanol 35% a 1013cm⁻¹

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,000824411	2	0,000412206	6,39017391	0,012895646	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000774074	12	6,45062E-05			
Total	0,001598485	14				

Anexo 170.Resumen del análisis de varianza de un factor para el metanol 55% a 1013 cm⁻¹

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	1,4900	0,2980	0,000301015
Día 2	5	1,6151	0,3230	5,10493E-05
Día 3	5	1,5637	0,3127	9,35388E-05

Anexo 171. Análisis de varianza de un solo factor para el metanol 55% a 1013 cm⁻¹

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,001582534	2	0,000791267	5,327169172	0,022089159	3,885293835
Dentro de los grupos	0,001782411	12	0,000148534			
Total	0,003364945	14				

Anexo 172.Resumen del análisis de varianza de un factor para el metanol 65% a 1013 cm⁻¹

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	2,0500	0,4100	0,0005
Día 2	5	2,2467	0,4493	0,0000
Día 3	5	2,2099	0,4420	0,0004

Anexo 173. Análisis de varianza de un solo factor para el metanol 65% a 1013 cm⁻¹

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,004374539	2	0,00218727	7,236684226	0,008674256	3,885293835
Dentro de los grupos	0,00362697	12	0,000302247			
Total	0,008001509	14				

Anexo 174.Resumen del análisis de varianza de un factor para el metanol 80% a 1013 cm⁻¹

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	2,7413	0,5483	0,0010
Día 2	5	2,8830	0,5766	0,0001
Día 3	5	2,8392	0,5678	0,0014

Anexo 175. Análisis de varianza de un solo factor para el metanol 80% a 1013 cm^{-1}

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,002105973	2	0,001052987	1,222138411	0,328785502	3,885293835
Dentro de los grupos	0,010339124	12	0,000861594			
Total	0,012445097	14				

C.3.4 Análisis de muestras

Anexo 176. Análisis de metanol (1013cm^{-1}) en diferentes licores mediante la metodología de curvas de calibración FT-IR día 1.

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción de metanol	% Metanol
C. Ron Márquez del Valle 8 años	0,0588	0,5000	0,1308	26,1566
C. Ron Santa FE	0,0578	0,6000	0,1292	21,5348
C. Ginebra	0,0598	0,6500	0,1323	20,3553
C. Vodka Absolut	0,0594	0,6250	0,1317	21,0725
C. Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	0,0539	0,7000	0,1233	17,6157
C. Chivas Regal	0,0585	0,6500	0,1303	20,0510
C. Muestra Verde	0,0595	0,8000	0,1319	16,4815
C. Muestra Morada	0,0597	0,6500	0,1321	20,3221
C. Aperitivo de Brandy Caravel	0,0548	0,6500	0,1247	19,1860
C. Aperitivo de Aguardiente	0,0553	0,5000	0,1254	25,0777
C. Cárcel 1	0,0565	1,0000	0,1273	12,7252
C. Cárcel 2	0,1927	1,0000	0,3354	33,5425
C. Cárcel 3	0,1724	1,0000	0,3044	30,4395

Anexo 177. Análisis de metanol (1013cm^{-1}) en diferentes licores mediante la metodología de curvas de calibración FT-IR día 2.

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción de metanol	% Metanol
C. Ron Márquez del Valle 8 años	0,0588	0,5000	0,1245	24,8936
C. Ron Santa FE	0,0578	0,6000	0,1230	20,5072
C. Ginebra	0,0598	0,6500	0,1258	19,3615
C. Vodka Absolut	0,0594	0,6250	0,1253	20,0481
C. Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	0,0539	0,7000	0,1177	16,8148
C. Chivas Regal	0,0585	0,6500	0,1241	19,0861
C. Muestra Verde	0,0595	0,8000	0,1254	15,6794
C. Muestra Morada	0,0597	0,6500	0,1257	19,3315
C. Aperitivo de Brandy Caravel	0,0548	0,6500	0,1190	18,3030
C. Aperitivo de Aguardiente	0,0553	0,5000	0,1196	23,9170

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción de metanol	% Metanol
C. Cárcel 1	0,0565	1,0000	0,1213	12,1272
C. Cárcel 2	0,1927	1,0000	0,3097	30,9708
C. Cárcel 3	0,1724	1,0000	0,2816	28,1620

Anexo 178. Análisis de metanol (1013 cm^{-1}) en diferentes licores mediante la metodología de curvas de calibración FT-IR día 3.

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción de metanol	% metanol
C. Ron Márquez del Valle 8 años	0,0588	0,5000	0,1109	22,1764
C. Ron Santa FE	0,0578	0,6000	0,1093	18,2164
C. Ginebra	0,0598	0,6500	0,1124	17,2950
C. Vodka Absolut	0,0594	0,6250	0,1118	17,8892
C. Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	0,0539	0,7000	0,1034	14,7663
C. Chivas Regal	0,0585	0,6500	0,1104	16,9889
C. Muestra Verde	0,0595	0,8000	0,1120	13,9946
C. Muestra Morada	0,0597	0,6500	0,1122	17,2616
C. Aperitivo de Brandy Caravel	0,0548	0,6500	0,1048	16,1187
C. Aperitivo de Aguardiente	0,0553	0,5000	0,1055	21,0911
C. Cárcel 1	0,0565	1,0000	0,1073	10,7330
C. Cárcel 2	0,1927	1,0000	0,3167	31,6736
C. Cárcel 3	0,1724	1,0000	0,2855	28,5523

C.4 Metanol 3271 cm^{-1}

C.4.2 Parámetros estadísticos generales

Anexo 179. Parámetros estadísticos generales de metanol a 3271 cm^{-1}

Metanol 5%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0007	0,0018	0,0015
Promedio	35,7973%	36,9769%	36,8894%
Precisión	0,0020	0,0049	0,0041
Exactitud	92,8405%	92,6046%	92,6221%
Límite de cuantificación	0,0072	0,0182	0,0150
Límite de Detección	0,0022	0,0055	0,0045
Metanol 15%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0007	0,0027	0,0053
Promedio	35,3493%	35,8256%	35,7711%

Precisión	0,0019	0,0074	0,0148
Exactitud	97,6434%	97,6116%	97,6153%
Límite de cuantificación	0,0065	0,0267	0,0530
Límite de Detección	0,0020	0,0080	0,0159
Metanol 25%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0027	0,0014	0,0012
Promedio	34,6525%	35,1484%	35,1947%
Precisión	0,0079	0,0040	0,0034
Exactitud	98,6139%	98,5941%	98,5922%
Límite de cuantificación	0,0272	0,0142	0,0120
Límite de Detección	0,0082	0,0042	0,0036
Metanol 35%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0022	0,0019	0,0023
Promedio	33,4869%	33,5574%	33,7062%
Precisión	0,0065	0,0057	0,0067
Exactitud	99,0432%	99,0412%	99,0370%
Límite de cuantificación	0,0218	0,0192	0,0227
Límite de Detección	0,0065	0,0058	0,0068
Metanol 55%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0065	0,0066	0,0034
Promedio	30,0667%	29,5700%	30,1295%
Precisión	0,0216	0,0224	0,0112
Exactitud	99,4533%	99,4624%	99,4522%
Límite de cuantificación	0,0650	0,0661	0,0338
Límite de Detección	0,0195	0,0198	0,0101
Metanol 65%			
Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0100	0,0016	0,0070
Promedio	26,1258%	24,7500%	25,2863%
Precisión	0,0382	0,0063	0,0277
Exactitud	99,5981%	99,6192%	99,6110%
Límite de cuantificación	0,0997	0,0157	0,0701
Límite de Detección	0,0299	0,0047	0,0210
Metanol 80%			

Parámetro	Día 1	Día 2	Día 3
Desviación estándar	0,0122	0,0041	0,0145
Promedio	20,4981%	19,6648%	20,0439%
Precisión	0,0594	0,0207	0,0723
Exactitud	99,7438%	99,7542%	99,7495%
Límite de cuantificación	0,1218	0,0407	0,1449
Límite de Detección	0,0365	0,0122	0,0435

C.4.3 Análisis multivariado

C.4.3.1 Estimación lineal

Anexo 180. Estimación lineal para el Metanol a 3271 cm⁻¹ en los tres días de análisis

Dia 1			Dia 2				Dia 3				
Estimacion lineal											
b	-4,911694751	1,927501956	a	b	-4,088187274	1,661229118	a	b	-4,711042122	1,879783989	a
sb	0,614914643	0,193688429	sa	sb	0,513493025	0,161387636	sa	sb	0,467478742	0,148902219	sa
r^2	0,927327504	0,081321566	sy/x	r^2	0,926885483	0,081568505	sy/x	r^2	0,953076796	0,065345325	sy/x
F	63,80181998	5	dF	F	63,38587166	5	dF	F	101,5570886	5	dF
ssrg	0,421934014	0,033065986	ssres	ssrg	0,421732895	0,033267105	ssres	ssrg	0,433649942	0,021350058	ssres

C.4.3.2 Análisis de varianza de un factor (ANOVA)

Anexo 181. Resumen del análisis de varianza de un factor para el metanol 5% a 3271 cm⁻¹

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	1,7899	0,3580	5,19805E-07
Día 2	5	1,8488	0,3698	3,30849E-06
Día 3	5	1,8445	0,3689	2,2555E-06

Anexo 182. Análisis de varianza de un solo factor para el etanol 5% a 3271 cm⁻¹

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,000431978	2	0,000215989	106,5072377	2,30051E-08	3,885293835
Dentro de los grupos	2,43352E-05	12	2,02793E-06			
Total	0,000456314	14				

Anexo 183.Resumen del análisis de varianza de un factor para el metanol 15% a 3271 cm⁻¹

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	1,7675	0,3535	4,28748E-07
Día 2	5	1,7913	0,3583	7,11569E-06
Día 3	5	1,7886	0,3577	2,80905E-05

Anexo 184. Análisis de varianza de un solo factor para el metanol 15% a 3271 cm⁻¹

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	6,79561E-05	2	3,39781E-05	2,86050988	0,096417356	3,885293835
Dentro de los grupos	0,00014254	12	1,18783E-05			
Total	0,000210496	14				

Anexo 185.Resumen del análisis de varianza de un factor para el metanol 25% a 3271 cm⁻¹

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	1,7326	0,3465	7,40369E-06
Día 2	5	1,7574	0,3515	2,00394E-06
Día 3	5	1,7597	0,3519	1,45013E-06

Anexo 186. Análisis de varianza de un solo factor para el metanol 25% a 3271 cm⁻¹

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	9,03295E-05	2	4,51647E-05	12,47902183	0,001171746	3,885293835
Dentro de los grupos	4,3431E-05	12	3,61925E-06			
Total	0,00013376	14				

Anexo 187.Resumen del análisis de varianza de un factor para el metanol 35% a 3271 cm⁻¹

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	1,6743	0,3349	4,75169E-06
Día 2	5	1,6779	0,3356	3,68364E-06
Día 3	5	1,6853	0,3371	5,14214E-06

Anexo 188. Análisis de varianza de un solo factor para el metanol 35% a 3271 cm⁻¹

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	1,25338E-05	2	6,26691E-06	1,384699359	0,287680607	3,885293835
Dentro de los grupos	5,43099E-05	12	4,52582E-06			
Total	6,68437E-05	14				

Anexo 189. Resumen del análisis de varianza de un factor para el metanol 55% a 3271 cm⁻¹

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	1,5033	0,3007	4,22071E-05
Día 2	5	1,4785	0,2957	4,37383E-05
Día 3	5	1,5065	0,3013	1,14082E-05

Anexo 190. Análisis de varianza de un solo factor para el metanol 55% a 3271 cm⁻¹

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	9,3961E-05	2	4,69805E-05	1,44772768	0,273378761	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000389414	12	3,24512E-05			
Total	0,000483375	14				

Anexo 191. Resumen del análisis de varianza de un factor para el metanol 65% a 3271 cm⁻¹

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	1,3063	0,2613	9,94117E-05
Día 2	5	1,2375	0,2475	2,46112E-06
Día 3	5	1,2643	0,2529	4,92081E-05

Anexo 192. Análisis de varianza de un solo factor para el metanol 65% a 3271 cm⁻¹

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,000480857	2	0,000240429	4,774173396	0,029826599	3,885293835
Dentro de los grupos	0,000604323	12	5,03603E-05			
Total	0,001085181	14				

Anexo 193.Resumen del análisis de varianza de un factor para el metanol 80% a 3271 cm⁻¹

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Día 1	5	1,0249	0,2050	1,48E-04
Día 2	5	0,9832	0,1966	1,65E-05
Día 3	5	1,0022	0,2004	2,10E-04

Anexo 194. Análisis de varianza de un solo factor para el metanol 80% a 3271 cm⁻¹

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	0,000174084	2	8,7042E-05	0,697038663	0,517143017	3,885293835
Dentro de los grupos	0,001498489	12	0,000124874			
Total	0,001672573	14				

C.4.4 Análisis de muestras

Anexo 195. Análisis de metanol (3271cm⁻¹) en diferentes licores mediante la metodología de curvas de calibración FT-IR día 1.

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción de metanol	% metanol
C. Ron Márquez del Valle 8 años	0,3490	0,5000	0,2134	42,6813
C. Ron Santa FE	0,3502	0,6000	0,2075	34,5796
C. Ginebra	0,3424	0,6500	0,2458	37,8131
C. Vodka Absolut	0,3443	0,6250	0,2363	37,8025
C. Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	0,3637	0,7000	0,1409	20,1335
C. Chivas Regal	0,3392	0,6500	0,2612	40,1907
C. Muestra Verde	0,3412	0,8000	0,2515	31,4344
C. Muestra Morada	0,3364	0,6500	0,2753	42,3505
C. Aperitivo de Brandy Caravel	0,3511	0,6500	0,2030	31,2326
C. Aperitivo de Aguardiente	0,3575	0,5000	0,1715	34,2922
C. Cárcel 1	0,3537	1,0000	0,1903	19,0323
C. Cárcel 2	0,3287	1,0000	0,3131	31,3113
C. Cárcel 3	0,3361	1,0000	0,2769	27,6883

Anexo 196. Análisis de metanol (3271cm⁻¹) en diferentes licores mediante la metodología de curvas de calibración FT-IR día 2.

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción de metanol	% Metanol
C. Ron Márquez del Valle 8 años	0,3490	0,5000	0,2345	46,9042
C. Ron Santa FE	0,3502	0,6000	0,2296	38,2644
C. Ginebra	0,3424	0,6500	0,2615	40,2263
C. Vodka Absolut	0,3443	0,6250	0,2535	40,5675
C. Aguardiente Blanco del Valle sin	0,3637	0,7000	0,1742	24,8857

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción de metanol	% Metanol
azúcar				
C. Chivas Regal	0,3392	0,6500	0,2743	42,2052
C. Muestra Verde	0,3412	0,8000	0,2662	33,2759
C. Muestra Morada	0,3364	0,6500	0,2860	44,0029
C. Aperitivo de Brandy Caravel	0,3511	0,6500	0,2259	34,7491
C. Aperitivo de Aguardiente	0,3575	0,5000	0,1996	39,9216
C. Cárcel 1	0,3537	1,0000	0,2153	21,5307
C. Cárcel 2	0,3287	1,0000	0,3175	31,7510
C. Cárcel 3	0,3361	1,0000	0,2874	28,7354

Anexo 197. Análisis de metanol (3271 cm^{-1}) en diferentes licores mediante la metodología de curvas de calibración FT-IR día 3

Muestra	Área	factor de dilución	Fracción de metanol	% Metanol
C. Ron Márquez del Valle 8 años	0,3490	0,5000	0,2357	47,1424
C. Ron Santa FE	0,3502	0,6000	0,2300	38,3376
C. Ginebra	0,3424	0,6500	0,2668	41,0413
C. Vodka Absolut	0,3443	0,6250	0,2576	41,2219
C. Aguardiente Blanco del Valle sin azúcar	0,3637	0,7000	0,1662	23,7429
C. Chivas Regal	0,3392	0,6500	0,2816	43,3216
C. Muestra Verde	0,3412	0,8000	0,2722	34,0282
C. Muestra Morada	0,3364	0,6500	0,2951	45,3932
C. Aperitivo de Brandy Caravel	0,3511	0,6500	0,2257	34,7296
C. Aperitivo de Aguardiente	0,3575	0,5000	0,1955	39,0960
C. Cárcel 1	0,3537	1,0000	0,2136	21,3571
C. Cárcel 2	0,3287	1,0000	0,3313	33,1345
C. Cárcel 3	0,3361	1,0000	0,2966	29,6595